

Effets des corrélations électroniques et du champ magnétique dans les semi-métaux de Weyl

par

Shaheen Acheche

Thèse présentée au département de physique
en vue de l'obtention du grade de docteur ès sciences (Ph.D.)

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 1 janvier 2019

Le 1er janvier 2019

le jury a accepté la thèse de Monsieur Shaheen Acheche dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Michel Pioro-Ladrière
Membre interne
Département de physique

Joseph Maciejko
Professeur
Membre externe
Département de physique
Université d'Alberta

Professeur Alexandre Blais
Président rapporteur
Département de physique

À ma mamoutou, mon papoutou, ma nanoussa et Clara

Sommaire

La découverte récente des semi-métaux de Weyl a ouvert la voie vers de nouvelles avenues de recherches. Une des questions soulevées par leur existence dans des matériaux réels est l'impact des corrélations électroniques dans des propriétés générales, topologiques et de transport lorsqu'ils sont soumis ou non à un champ magnétique externe. Pour répondre à cette question, cette thèse se divise en quatre grands points :

En se basant sur un modèle sur réseau brisant la symétrie par renversement du temps, un premier état des lieux sur les propriétés générales de semi-métaux de Weyl dans le paradigme de la théorie du champ moyen dynamique est dressé. A l'aide d'un solveur d'impureté basé sur la diagonalisation exacte, l'étude de propriétés sensibles aux corrélations électroniques comme la double occupation et le poids de quasi-particules nous permet de conclure que les semi-métaux de Weyl sont des matériaux peu corrélés. Cependant, les interactions peuvent entraîner de profonds changements sur les propriétés intrinsèques des nœuds de Weyl comme leur nombre ou leur position dans la zone de Brillouin. Les mécanismes derrière ces changements ont été étudiés d'un point de vue diagrammatique ainsi que par le biais des symétries du réseau.

A partir de ce premier état des lieux, nous avons étudié l'impact des corrélations électroniques sur l'effet Hall anormal et sur l'aimantation orbitale de semi-métaux de Weyl ferromagnétiques. La renormalisation des propriétés intrinsèques aux nœuds de Weyl du fait des interactions électron-électron de type Hubbard augmente la contribution topologique à l'effet Hall anormal. Cependant, bien qu'intimement liée aux conductivités transverses et donc à la conductivité de Hall anormale, l'aimantation orbitale n'est pas une quantité protégée topologiquement. Du fait des interactions, cette dernière se voit être le théâtre d'une compétition entre deux mécanismes antagonistes : d'un côté, le renforcement de l'effet Hall anormal a tendance à augmenter les valeurs de l'aimantation orbitale alors que de l'autre côté, le poids de quasi-particules entraîne la tendance inverse. Lorsque les corrélations électroniques sont modérément faibles, cette compétition résulte en un quasi match nul et

l'aimantation orbitale n'est que faiblement affectée par les interactions. *A contrario*, dans le régime des fortes corrélations, c'est le poids de quasi-particules qui domine et qui entraîne une diminution de l'aimantation.

Dans une troisième partie, nous avons prouvé de façon rigoureuse la validité de la théorie de champ moyen dynamique lorsque l'effet orbital induit par un champ magnétique externe affecte la dispersion d'énergie des électrons. Pour montrer l'étendue du potentiel de cette méthode, nous l'avons appliquée sur le réseau carré soumis à un champ magnétique externe avec un rapport de flux magnétique rationnel. Ainsi, la théorie de champ moyen capture parfaitement la physique des électrons soumis à un champ magnétique externe dont elle exhibe d'intéressantes propriétés comme la renormalisation de la pulsation cyclotron ou les oscillations quantiques dans le temps de demi-vie des quasi-particules.

Enfin, la dernière partie de ce travail de thèse consiste à appliquer la théorie du champ moyen dynamique sur un semi-métal de Weyl avec interaction d'Hubbard et soumis à un champ magnétique. A basse température, ce système exhibe les mêmes propriétés générales qu'en absence de champ magnétique. Lorsque l'on augmente la température, deux régimes distincts sont visibles dans la double occupation et les transitions d'un régime à l'autre se font de manière indépendante de l'intensité du champ magnétique. En matière de propriétés de transport, on note la présence d'une magnéto-conductivité positive caractérisée par l'apparition d'un pic de Drude. L'évolution de ce dernier est entièrement gouvernée par le poids de quasi-particules. Enfin, nous montrons que la transition entre les deux régimes de température est aussi visible avec le comportement thermique de la conductivité optique.

Remerciements

En matière de remerciements, il est parfois plus facile de dire que d’écrire. Et alors que mes remerciements oraux ont été particulièrement chargés en émotions, je me retrouve paradoxalement à batailler pour écrire cette partie de ma thèse.

Mes premiers remerciements vont à André-Marie Tremblay, mon directeur de thèse. Lorsque je suis revenu à Sherbrooke pour mon doctorat, je savais déjà que j’avais la chance d’avoir un chercheur de renommée dans son domaine mais je ne m’attendais vraiment pas du tout à rencontrer une personne aux qualités humaines extraordinaires, à la bienveillance naturelle et à la gentillesse inégalée. Devant les drames ordinaires qui ont jonché mes trois années de doctorat, tu as toujours été à l’écoute et tu as facilité les choses pour minimiser mes tracas et pour cela, je t’en serai à jamais reconnaissant. Je n’oublie bien évidemment pas ta connaissance encyclopédique en physique qui m’a toujours impressionné et aidé dans mes travaux de thèse. Merci.

Je remercie également mon comité de thèse, Alexandre Blais, Michel Pioro-Ladrière, Joseph Maciejko et André-Marie Tremblay, pour leurs conseils avisés et la relecture de mon premier manuscrit de thèse. Je suis conscient de l’ampleur de la tâche et je remercie vos commentaires constructifs, vos conseils avisés et aussi vos encouragements. Je suis ressorti enchanté de ma soutenance de thèse car j’y ai eu des discussions intéressantes qui balayaient l’ensemble du spectre de mon travail de thèse : des fondamentaux aux perspectives ouvertes.

Merci à tout ceux que j’ai côtoyé au département de physique, mon **village** pour paraphraser mon directeur de thèse¹. Cela inclut un grand nombre de personnes mais je prends le risque de me lancer dans une liste (quasi) exhaustive. Je pense d’abord au groupe de recherche d’André-Marie, Alexis Reymbaut (qui m’a fait venir à Sherbrooke!), Simon Verret, Maxime Charlebois, Louis Bourassa, Anne-Marie Gagnon, Reza Nourafkan, Jan Gukelberger, Yan Wang, Charles-David Hebert, Olivier Simard et Chloé-Aminata Gauvin-Ndiaye. Avec

1. Référence au proverbe Sénégalais : *Il faut un village pour élever un enfant.*

vous, j'ai eu de belles discussions de physique mais surtout de sujets divers et variés ! Je n'oublie pas David Sénéchal, Alexandre Foley, Jean-Paul Latyr Faye, Sékou-Oumar Kaba et Sidhartha Dash, aussi je tiens à remercier Ion Garaté, Simon Bertrand, Pierre Rinkel, Pedro Lopes, Samuel Boutin et Jorge Rodriguez. Mais aussi Jeffrey Quilliam qui m'a donné la chance d'être son chargé d'exercice, Arash Akbari, Redha Raouane, la gang du foot et le Recsus. Je n'oublie pas les stagiaires qui m'ont fait confiance et qui ont accéléré la fin de mon travail : Nicolas Martin et Jaychandra Padayasi.

Sur une note plus personnelle, j'ai conscience de la chance que j'ai d'avoir rencontré tout au long de ma vie des amis extraordinaires : Selim Boussetta, Nicolas Dejanovic, Aïcha Maghraoui, Jules Biche, Hedi El Younsi, Malek Ben Sliman, (ya 3a2ileti) Mourad Mokrani, Tarak Saied, Malte Hoffmann, Angelique Serra, Jérôme Leconte, Alexia Perroux, Jean Garcin, Louis Hénau, Olivier Coen, Alexandre Bordat, Jérôme Michon, Louis Doneche, Victor Barolle, Quentin Iprex-Garcia, Jean-Marie Lentali, Nicolas Thomé, Seijin Kobayashi (bande de Tazons), Marianne Leurent, Nathalie Lereau, Clothilde Guinard, Mathilde Guillaumin (bande de Tazonne), Simon Yves, Samuel Métais, Alexis Reymbaut, Reza Nourafkan (*Swit-ching in English for you: I would like to thank you for your friendship and your mentoring that helped me a lot in my work and in my personal life.*), Charles-David Hebert, Redha Raouane, Arash Akbari, Maude Lizaïre, Jehan Rubin, Ellen Haas, Emilie Lefol, Thibaut Hestin, Clément Collignon, Anaëlle Legros, Simon Bertrand (avec qui je ne partage qu'un cerveau, GM) et Pierre Rinkel (Protman). En écrivant cette liste, je me suis dit qu'elle était bien longue et c'est un sentiment de joie qui émane de cette conclusion. Une pensée à mes anciens colocs avec qui j'ai passé des moments incroyables.

Ma famille de sang n'est pas en reste. Je remercie mes grand-parents, Mémé, Mima, Baba et Gatouz, pour m'avoir donné l'amour dont j'avais besoin. Mes oncles et mes tantes qui ont toujours été là pour moi Leïla, Nadia, Farida, Mourad et Hedi. Sans oublier mes cousins et cousines Houda, Meriem, Alexandre, Aziz et Mondher.

Merci à toi, ma chère et tendre Clara Nicolas, pour être rentrée dans ma vie, tout chambouler et m'avoir laissé faire de même dans la tienne. Je ne pensais jamais rencontrer une personne qui me comprenne aussi bien que toi, dans mes travers et mes défauts (et aussi mes qualités).

Enfin, les derniers remerciements vont aux personnes qui me sont le plus chers : ma mère Sophie Yahia, mon père Mustapha Acheche et ma sœur Anissa Acheche. Vous ne pouvez pas imaginer à quel point je suis heureux de vous avoir. Merci maman pour m'avoir façonné à ton image. N7abek 9ad el smé. Ta beauté, ta sagesse, l'amour que tu portes à Anissa et moi et ta gentillesse n'ont d'égaux que ta force et ton courage. Merci Papa pour

m'avoir aussi façonné à ton image. Tu m'as donné le gout de la physique, donné une patience proche de zéro et une forme de malice qui détonne. Enfin, merci Anissa. Que j'admire ton aisance sociale, ton intelligence et je clôture ces remerciements en réaffirmant à quel point je suis fier de toi. Sans vous trois, je ne pense pas que j'aurai entrepris ce doctorat et c'est pour cela que ma thèse vous est dédiée.

Table des matières

Sommaire	ii
Introduction	1
1 Les semi-métaux de Weyl	4
1.1 Théorie des semi-métaux de Weyl	5
1.1.1 Des semi-métaux de Dirac aux semi-métaux de Weyl	5
1.1.2 Topologie des bandes	8
1.1.3 Semi-métaux de Weyl et champ magnétique	10
1.2 Propriétés de transport remarquables : magnéto-résistance négative et effet Hall anormal	12
1.2.1 Effet Hall anormal	12
1.2.2 La magnéto-résistance négative	13
1.3 Découvertes expérimentales	14
1.3.1 Les matériaux non-centrosymétriques : TaAs, NaAs, NaP	14
1.3.2 D'autres candidats : $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ et Mn_3Sn	16
1.4 Résumé	18
2 La théorie du champ moyen dynamique	20
2.1 Méthodologie	21
2.1.1 Définition à temps et fréquences réelles	21
2.1.2 Cas d'un système invariant par translation	22
2.1.3 Équation du mouvement dans le cas d'un Hamiltonien quadratique	23
2.1.4 Un outil mathématique pour les température finie : Les fréquences de Matsubara	23
2.1.5 L'équation de Dyson	24
2.2 Aparté sur la physique du modèle d'Hubbard	25
2.3 Les équations de la théorie du champ moyen dynamique	28
2.4 Le modèle d'Anderson et la théorie du champ moyen dynamique	34

2.4.1	La boucle de la théorie du champ moyen dynamique	35
2.5	La théorie de la perturbation itérée	36
2.5.1	La théorie de la perturbation itérée	36
2.5.2	Comportement asymptotique de la fonction d'hybridation	38
2.6	La diagonalisation exacte	39
2.7	Résumé	41
3	Semi-métaux de Weyl et interactions	43
3.1	Effets des interactions sur les semi-métaux de Weyl dans le paradigme de la théorie du champ moyen dynamique	44
3.1.1	Modèle sans interaction	44
3.1.2	Propriétés générales : Double occupation, poids de quasi-particule, etc.	45
3.1.3	Positions des nœuds et phase isolante	50
3.2	Comparaison du temps de demi-vie des quasi-particules avec d'autres méthodes numériques	51
3.2.1	De l'existence d'un liquide de Fermi marginal en théorie du champ moyen dynamiques	52
3.3	Résumé	53
4	Effet Hall anormal et aimantation orbitale dans les semi-métaux de Weyl interagissants	55
4.1	L'effet Hall anormal	57
4.1.1	Le cas des semi-métaux de Weyl ferromagnétiques	59
4.1.2	Modèle sur réseau et absence d'interaction	61
4.1.3	Effet d'interaction de type Hubbard sur l'effet Hall anormal	64
4.1.4	Origines de Σ^z et Σ^I	65
4.2	L'aimantation orbitale	66
4.2.1	Semi-métaux de Weyl sans interaction et formule de Středa	68
4.2.2	Effet des interactions et modification de la formule de Středa	70
4.3	Résumé	73
5	La théorie du champ moyen dynamique en présence d'un champ magnétique externe et uniforme	75
5.1	Comment prendre en compte l'effet orbital dû à un champ magnétique externe et uniforme dans un réseau ?	76
5.1.1	La brisure de l'invariance par translation dans un réseau soumis à un champ magnétique	76

5.1.2	Définition d'un opérateur de translation magnétique et d'une zone de Brillouin magnétique	76
5.1.3	Énergies propres des électrons de Bloch soumis à un champ magnétique	78
5.2	Dérivation des équations de la DMFT en présence d'un champ magnétique externe et uniforme	80
5.2.1	Fonction de Green invariante par translation et équation du mouvement	80
5.2.2	Les équations de la théorie du champ moyen dynamique en présence d'un champ magnétique externe et uniforme	82
5.3	Application à un réseau carré avec interaction d'Hubbard	84
5.3.1	Effet du champ magnétique sur la self-énergie	84
5.3.2	Renormalisation des niveaux de Landau	85
5.3.3	Oscillations quantiques dans le temps de demi-vie des quasi-particules	87
5.4	Résumé	90
6	Semi-métaux de Weyl sous champ magnétique : magnéto-résistance négative et interaction	92
6.1	Effet orbital du champ magnétique	93
6.1.1	Structure de bande et densité d'états	93
6.1.2	Interaction et champ magnétique	94
6.2	Magnéto-résistance négative	99
6.2.1	Définitions mathématiques	100
6.2.2	Conductivité optique et effet orbital du champ magnétique	101
6.2.3	Renormalisation du pic de Drude	102
6.2.4	Dépendance en température et changement de comportement	104
6.3	Résumé	106
	Conclusion	108
A	Calculs diagrammatiques	111
A.1	Fonction de Green libre d'une impureté libre couplée à un bain	111
A.2	Perturbation au second ordre dans le modèle de Hubbard :	113
B	Prolongement analytique par la méthode des approximants de Padé.	116
B.1	Définition mathématique et algorithme	117
C	Poids de quasi-particules dans un semi-métal de Weyl en DMFT	119
D	Approche perturbative du champ magnétique sur les électrons de Bloch	121
D.1	Matrice de Harper et opérateur d'échelle	121

<i>Table des matières</i>	xi
D.1.1 Théorie des perturbations	122
D.1.2 Comparaison de notre développement perturbatif :	127
E Phases magnétiques et transition de Mott dans les conducteurs organiques	129
E.1 Article	130
Bibliographie	137

Liste des tableaux

3.1	Symétries discrètes et leurs effet sur les opérateurs de création et de destruction à $\hbar = 0$	46
D.1	Corrections aux énergies propres de l'Hamiltonien de Harper	128

Table des figures

1.1	Nœud de Weyl sous champ magnétique : dispersion d'énergie et densité d'états locale.	10
1.2	Images ARPES sur exhibant des arcs de Fermi sur TaAs et TaP	15
1.3	Comparaison entre les expériences ARPES et des calculs <i>ab-initio</i> sur Mn ₃ Sn	17
2.1	Croquis de la densité d'états locale d'un système sous interaction d'Hubbard	27
2.2	Schéma de la cavité et de l'impureté quantique	28
3.1	Densité d'états locale avec et sans interaction d'Hubbard.	47
3.2	Comparaison entre les réseaux cubique et semi-métal de Weyl de : la self-énergie, le poids des quasi-particules et la double occupation	50
4.1	Schéma de deux nœuds de Weyl séparé dans la zone de Brillouin	60
4.2	Conductivité anormale de Hall sur un modèle sur réseau sans interaction.	63
4.3	Conductivité anormale de Hall en présence d'interaction	64
4.4	Self-énergies obtenues à partir d'une approche perturbative d'ordre deux	67
4.5	Aimantation orbitale avec et sans interaction	69
4.6	Généralisation aux interactions de la formule de Středa.	72
5.1	Réseaux sous champ magnétique. Visualisation de la cellule unité magnétique et du flux magnétique par plaquette	77
5.2	Papillon d'Hofstadter et densité d'états	79
5.3	Self-énergie en fonction de fréquence de Matsubara pour $p/q = 0, p/q = 1/100$ et $p/q = 1/10$	85
5.4	Densité d'états locale pour différentes valeurs d'interaction U à $\beta = 100$ et $p/q = 1/100$ et différence d'énergie des deux niveaux de Landau les plus proches du niveau de Fermi en fonction du poids de quasi-particule.	86
5.5	Inverse du temps de demi-vie des quasi-particules en fonction de q/p pour $n = 0.6, U = 4$ et $\beta = 80$ et en fonction de $1/q$ pour $U = 2$ et $\beta = 80$ et $n = 1$	88

6.1	Dispersions des niveaux de Landau et densité d'états partielle dans le modèle de semi-métaux de Weyl sur réseau pour $q = 16$	95
6.2	Comparaison des self-énergies pour $q = \infty$, $q = 16$ et $q = 40$ à $\beta = 80$. Self-énergie à $q = 16$ loin du demi-remplissage. Position des niveaux de Landau chiraux en fonction des interactions. Densité d'états locale pour $q = 16$ à $U = 0$ et $U = 12$	97
6.3	Double occupation en fonction de la température pour $q = \infty$, $q = 40$ et $q = 16$ à $U = 12$	99
6.4	Conductivité optique en fonction des fréquences réelles pour $q = 16$ et $q = 40$. Conductivité optique en fonction des fréquences réelle pour différentes valeurs de U à $q = 40$	101
6.5	Fonction de corrélation courant courant à $q = 16$ en fonction fréquence de Matsubara bosonique. Poids de Drude normalisé et poids de quasi-particules pour $q = 16$ et $q = 40$. Rapport du poids de Drude avec les autres excitations permises.	103
6.6	Conductivités optiques en fonction des fréquences réelles pour $q = 16$ et $q = 40$ à différentes températures pour $U = 12$	105
A.1	Diagrammes de Feynman de la fonction de Green d'un état isolé, de la fonction de Green d'un état du bain et du premier vertex non nul contribuant au calcul total.	112
A.2	Diagrammes de Feynman de la fonction de Green d'une impureté non interagissante couplée à un bain.	112
A.3	Diagramme d'ordre deux et diagramme à bulle	113

Introduction

La physique, en tant que reine de toutes les sciences, regroupe une multitude de domaines différents qui ont leur propre paradigme, leurs outils mathématiques spécifiques et même leur propre langage. Cette situation ne va pas en diminuant puisque chaque découverte expérimentale, soutenue par des avancées technologiques en accélération continue, ouvre potentiellement une porte vers un nouveau paradigme et, peut-être, un nouveau domaine de la physique.

A la lumière de cette grille de lecture simpliste de la physique, tout sépare la physique des problèmes à N-corps et la physique topologique.

La première est un vieux domaine qui n'a pas attendu l'avènement de la mécanique quantique pour donner du fil à retordre aux physiciens. Déjà avec la physique newtonienne, trouver la solution analytique à un problème mettant en jeu plusieurs objets en interaction gravitationnelle est d'une difficulté inouïe et, sauf cas rarissimes, des recours à des approximations, à des approches perturbatives et à des calculs numériques sont nécessaires. Le problème à N-corps en mécanique quantique et plus précisément en physique de la matière condensée ne déroge pas à la nécessité de ces recours en s'intéressant à résoudre le problème de 10^{23} électrons en interaction coulombienne. Ainsi en forçant le trait jusqu'à la caricature, le problème à N-corps est né avec la mécanique newtonienne en 1687 et la publication de *Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica* et, malgré de profondes mutations et de changement de paradigmes, reste à ce jour un domaine de recherche dynamique.

La physique topologique moderne est bien plus jeune que la physique des problèmes à N-corps. Bien que ses manifestations expérimentales aient posé problème aux physiciens depuis le XIX^e siècle avec l'effet Hall anormal (qui est abordé dans ce travail de thèse), ce n'est qu'au milieu des années 1980 que les fondements de ce domaine de la physique ont été posés. Reposant essentiellement sur les bandes électroniques des électrons dans un solide en absence d'interaction et à température nulle, elle a gagné ses titres de noblesse en offrant des explications théoriques à un grand nombre de phénomènes physiques tels que l'effet

Hall anormal et l'effet Hall quantique mais aussi en prédisant de nouvelles transitions de phases de nature topologique comme la transition Berezinsky-Kosterlitz-Thouless. Depuis les années 2000, la physique topologique a connu un regain d'intérêt avec la mise en évidence expérimentale de bon nombre de ses concepts. Il est aussi important de noter qu'elle est largement utilisée pour décrire des manifestations de la physique des hautes énergie dans la physique du solide avec notamment les semi-métaux de Dirac et, depuis peu, les semi-métaux de Weyl.

Dans cette vision de la physique divisée en petites boîtes, beaucoup de notions séparent la physique des problèmes à N-corps et la physique topologique. On peut voir cette séparation nette dans leur apparition dans l'histoire des sciences et les paradigmes physiques sur lesquelles elles reposent. A cela se rajoute parfois un langage emprunté à la physique des hautes énergies qui peut laisser coï un physicien ayant une formation de physique du solide. Bien évidemment, cette grille de lecture est extrêmement simplifiée et à la limite de la caricature mais elle explique néanmoins l'existence de langages hermétiques entre les domaines de la physique distincts.

Est-ce que cela signe le cloisonnement total des spécialités de la physique dans leur propre paradigme ? Bien évidemment, la réponse à cette question est négative. A l'exception de domaines reposant sur des paradigmes fondamentalement opposés comme la relativité générale et la physique quantique par exemple, les frontières entre les domaines de la physique sont floues et les sujets d'études hybrides appartiennent d'abord à un domaine physique plus général qui facilite le langage commun. Par exemple, dans le cas des semi-métaux de Dirac ou de Weyl, des phénomènes propres à la physique des hautes énergies ne sont pas forcément directement transposables dans la physique du solide mais peuvent trouver un équivalent. Ainsi, l'anomalie chirale telle qu'elle est définie dans les hautes énergies ne peut exister dans une zone de Brillouin mais elle a son équivalent local dont les conséquences sont mesurables : la magnéto-résistivité négative.

Ce travail de thèse se situe à la frontière de deux (voire trois) domaines en faisant le choix d'une approche résolument tournée vers la physique du solide. Le chapitre 1 est une introduction aux semi-métaux de Weyl. Sans rentrer dans les détails mathématiques et en abordant une approche basée sur la physique du solide, les principales propriétés des semi-métaux de Weyl sont abordées. Ces propriétés comme le concept de nœuds de Weyl, la chiralité ainsi que la courbure de Berry qui leur sont associées mais aussi l'effet orbital induit par un champ magnétique se retrouveront utiles dans les chapitres suivants. On y trouve aussi une discussion sur les manifestations expérimentales avec les preuves directes et indirectes qui sont avancées. Le chapitre 2 est une introduction aux concepts mathématiques et aux méthodes numériques de la physique des problèmes à N-corps. Ainsi,

on introduit des outils mathématiques tels que les fonctions de Green ou les fréquences de Matsubara. Une dérivation des équations de la théorie du champ moyen dynamique est faite. Les notions relatives à cette théorie comme son lien avec le problème d'impureté quantique permettent de présenter deux solutionneurs d'impureté : la théorie des perturbations itérées et la diagonalisation exacte. Le chapitre 3 est consacré aux effets des interactions de type Hubbard sur un modèle de semi-métal de Weyl sur réseau brisant la symétrie par renversement du temps dans le paradigme de la théorie du champ moyen dynamique et d'un solutionneur d'impureté basé sur la diagonalisation exacte. Une comparaison est faite avec le réseau cubique pour déterminer l'importance des corrélations sur des propriétés comme la double occupation et le poids de quasi-particule. Deux explications se basant sur les diagrammes de Feynman et sur les symétries du réseau sont données sur le changement de position des nœuds de Weyl dû aux interactions. Le chapitre 4 aborde les effets des corrélations électroniques sur deux quantités mesurables : l'effet Hall anormal et l'aimantation orbitale. Nous y expliquons comment les interactions renforcent la partie topologique de l'effet Hall anormal ainsi que leurs effets contraires sur l'aimantation orbitale. Dans le chapitre 5, une dérivation rigoureuse prouve que la théorie du champ moyen dynamique est applicable dans le cas où les électrons du système subissent l'effet orbital induit par un champ magnétique externe. Cette théorie est alors appliquée dans le cas d'un réseau carré dont le flux magnétique par plaquette est un rationnel et en utilisant la théorie des perturbations itérées comme solutionneur d'impureté. Les effets combinés des interactions et de l'effet orbital dû au champ magnétique sont notamment visibles sur le temps de vie des quasi-particules ainsi que sur la renormalisation de la pulsation cyclotron. Enfin le chapitre 6 applique la théorie du champ moyen dynamique au cas d'un semi-métal de Weyl soumis à un champ magnétique externe. Comme pour le chapitre 3, une discussion sur l'importance des corrélations dans ce système est présentée. Les conséquences d'un champ magnétique sur la conductivité optique longitudinale ainsi que l'effet des corrélations électroniques sont étudiés. En faisant varier la température, on observe la présence de deux régimes thermiques distincts et visibles dans la double-occupation et dans la conductivité optique.

Chapitre 1

Les semi-métaux de Weyl

Une brève introduction historique aux semi-métaux de Weyl

L'histoire des semi-métaux de Weyl tire ses origines à l'adolescence de la physique quantique. En 1928, Paul Dirac publie son équation éponyme dans le but de lier la mécanique quantique et la relativité restreinte [1]. Il proposa aussi une solution se basant sur des matrices complexes 4×4 (que l'on appelle aujourd'hui les matrices gamma) et permis une nouvelle compréhension des constituants de la matière. Cette équation stimula un grand nombre de publications et une petite année plus tard, le mathématicien allemand Hermann Weyl proposa une autre solution à l'équation de Dirac [2] en s'appuyant, cette fois-ci, sur les matrices de Pauli (des matrices complexes 2×2 très similaires aux matrices gamma) [3]. Cette simplification impose à ces *fermions de Weyl* d'être caractérisés par un nombre quantique appelé chiralité, une paire de fermions de Weyl de chiralité opposée formant un fermion de Dirac. La solution de Weyl fut longtemps utilisée pour décrire les neutrinos que l'on pensait sans masse et qui portent aussi une notion de chiralité avant que les avancées expérimentales fassent tomber en désuétude cette théorie, l'abandon étant totalement consommé avec les expériences de MacDonald et Kajita [4, 5] qui prouvent que les neutrinos ont bel et bien une masse.

Similairement au graphène qui peut être vu comme une manifestation à basse énergie de la physique des hautes énergies, la matière condensée a permis de ranimer l'attention des chercheurs sur les fermions de Weyl. En effet, en s'appuyant sur des calculs théoriques, l'équipe de Yang et al. [6] a montré en 2011 que des semi-métaux de Weyl pouvaient exister dans des matériaux réels. Cette preuve théorique a été confirmée par des preuves expérimentales en 2015 dans l'arséniure de tantale (TaAs) d'abord [7, 8, 9, 10, 11] puis dans plusieurs

membres de sa famille [12, 13, 14], apportant une dimension expérimentale à la physique de Weyl.

Au contraire d'autres domaines de la physique de la matière condensée (les cuprates en tête), la physique des semi-métaux de Weyl est essentiellement conduite par la théorie. Ainsi, il est intéressant de comprendre ce qui est remarquable dans ces matériaux si particuliers.

Ce chapitre a pour but d'introduire le sujet des semi-métaux de Weyl en adoptant une approche tournée vers la matière condensée. Une grande partie des propriétés remarquables des semi-métaux est introduite dans la section 1.1 à l'aide d'un modèle effectif simple obtenu en partant de l'équation de Dirac. Ainsi, au fil des sous-sections, sont abordées les questions de la brisure de symétries, des propriétés topologiques ainsi que de l'effet orbital induit par un champ magnétique sur ces semi-métaux. Une brève discussion des conséquences de la topologie sur les propriétés de transport est faite dans la deuxième section 1.2. Cette discussion se concentre principalement sur l'effet Hall anormal ainsi que la magnétorésistance négative qui sont étudiés de façon plus détaillée dans les chapitres 4 et 6 respectivement. Enfin, la section 1.3 discute des avancées expérimentales dans le domaine en parlant des premières manifestations expérimentales avec TaAs et d'autres membres de sa famille dans la sous-section 1.3.1 ainsi que des candidats brisant la symétrie par renversement du temps dans la sous-section 1.3.2.

1.1 Théorie des semi-métaux de Weyl

1.1.1 Des semi-métaux de Dirac aux semi-métaux de Weyl

Depuis l'avènement du graphène dans les années 2000 [15], la physique des hautes énergies a commencé à trouver un grand nombre d'équivalents de ses concepts dans la physique de la matière condensée. Les cas les plus connus sont bien évidemment les semi-métaux de Dirac dont les fonctions d'onde Ψ peuvent être obtenues grâce à l'équation de Weyl, un cas particulier de l'équation de Dirac caractérisé par l'absence de terme de masse :

$$\hbar \left(\sigma_0 \otimes \tau_0 \left(-i \frac{\partial}{\partial t} \right) + v_F \tau_z \otimes \sigma_z \cdot \mathbf{P} \right) \Psi = 0 \quad (1.1)$$

avec \mathbf{P} , l'opérateur quantité de mouvement et où v_F a la dimension d'une vitesse. Les matrices σ et τ sont des matrices de Pauli qui agissent dans des espaces différents comme par exemple l'espace des spins et des orbitales et l'indice 0 marque les matrices identité dans

les espaces respectifs de ces dernières. On peut obtenir les valeurs propres de l'équation 1.1 en utilisant les vecteurs moments \mathbf{k} associés à l'opérateur quantité de mouvement :

$$E_{\pm} = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|. \quad (1.2)$$

Chacune des énergies E_{\pm} est dégénérée deux fois à cause de la présence des deux sous-espaces. D'un point de vue de la physique des hautes énergies, l'énergie négative correspond à l'énergie de l'anti-particule associée à la particule relativiste. D'un point de vue de la matière condensée, les énergies E_- et E_+ forment respectivement les bandes de valence et de conduction et le concept d'anti-particule étant remplacé par le concept de trou¹.

Dans le cas simple et isotrope, l'Hamiltonien associé à l'équation de Weyl 1.1 peut s'écrire² :

$$\mathbf{H}_{\text{Dirac}} = \tau_z \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.3)$$

Les énergies propres de ce dernier ont les mêmes expressions et les mêmes dégénérescences que dans l'équation 1.2. Cet Hamiltonien générique modélise donc la physique au voisinage d'un cône de Dirac et nous permet de lister un certain nombre de ses propriétés : un cône de Dirac est donc caractérisé par des bandes électroniques linéaires doublement dégénérées qui se touchent en un seul point quadruplement dégénéré. Physiquement, une des causes qui peut permettre d'obtenir un Hamiltonien de la même forme que l'équation 1.3 est la présence d'un couplage spin-orbite. Il faut néanmoins nuancer cette affirmation : la présence d'un couplage spin-orbite n'est ni nécessaire (cf. le graphène) ni suffisante pour obtenir un semi-métal de Dirac mais elle est fortement utile pour obtenir des propriétés topologiques [16, 17].

Les semi-métaux de Weyl présentent une grande similarité avec les semi-métaux de Dirac à la différence que le point où se croisent les bandes électroniques linéaires n'est dégénéré que deux fois dans les premiers. Ce point de croisement doublement dégénéré s'appelle alors un *nœud* de Weyl. Ainsi, un semi-métal de Dirac peut être vu comme une superposition de deux nœuds de Weyl. Pour obtenir la levée de dégénérescence, il faut briser au moins une des symétries suivantes : la symétrie de renversement du temps ou la symétrie par inversion. En fonction de la symétrie brisée, les conséquences seront différentes pour les nœuds de Weyl.

1. Anecdote intéressante dans l'histoire des sciences : en résolvant son équation pour le cas d'un électron, Dirac s'est retrouvé pris au dépourvu par la présence de cette énergie propre négative. Il a alors supposé l'existence d'une mer de Dirac, analogue à la mer de Fermi pour les particules relativistes, ce qui lui permit d'utiliser la notion de *trou*. Ce n'est que quelques années plus tard que l'on comprit que la solution négative était en fait le positron, anti-particule de l'électron.

2. On omet le produit tensoriel \otimes à partir de maintenant.

Brisure de la symétrie par inversion

On peut briser facilement la symétrie par inversion en rajoutant, par exemple, un terme de perturbation de la forme :

$$\mathbf{H}_{\text{Per}} = m\boldsymbol{\tau}_z \quad (1.4)$$

au système 1.3. Ce terme va séparer en énergie les deux nœuds de Weyl constituant le cône de Dirac puisque les nouvelles énergies du système s'écrivent :

$$E_{1\pm} = m \pm \hbar v_F |\mathbf{k}| \quad (1.5)$$

$$E_{2\pm} = -m \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|. \quad (1.6)$$

Dans ce cas précis, la brisure de symétrie d'inversion ne crée pas un semi-métal de Weyl à proprement parler puisque les nœuds sont encore situés aux mêmes points dans la zone de Brillouin et on ne peut avoir de nœud de chiralité bien définie dans ce cas (cf. discussion sur la chiralité dans la section 1.1.2). Pour créer un semi-métal de Weyl à partir d'un semi-métal de Dirac en brisant la symétrie par inversion, il est nécessaire d'avoir "au départ" au moins deux cônes de Dirac, ce qui amène à quatre, le nombre minimal de nœuds de Weyl lorsque la symétrie d'inversion est brisée.

Brisure de la symétrie par renversement du temps

La brisure de la symétrie par renversement du temps peut s'obtenir de façon similaire à la sous-sous-section précédente en rajoutant un terme

$$\mathbf{H}_{\text{Per}} = m\boldsymbol{\sigma}_z \quad (1.7)$$

au système 1.3. Ce terme peut être vu comme un terme Zeeman qui brise la symétrie par renversement du temps par le biais d'un champ magnétique externe. Les énergies propres du système sont alors :

$$E_{1\pm} = \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \left(k_z + \frac{m}{\hbar v_F}\right)^2} \quad (1.8)$$

$$E_{2\pm} = \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \left(k_z - \frac{m}{\hbar v_F}\right)^2}. \quad (1.9)$$

On voit clairement que le système comporte deux nœuds de Weyl bien différenciés dans l'espace réciproque et situés aux points $(0, 0, \pm m/\hbar v_F)$. Ce cas de figure de semi-métal de

Weyl avec brisure de symétrie par renversement du temps nous permet aussi de comprendre l'Hamiltonien effectif minimal utilisé pour modéliser un nœud dans la littérature. En effet, dans le cas isotrope, avec un changement de coordonnées adéquat, l'Hamiltonien au niveau d'un nœud s'écrit :

$$\hat{H}_{WSM} = \chi \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.10)$$

avec $\chi = \pm 1$, la chiralité associée au nœud de Weyl.

1.1.2 Topologie des bandes

A partir du modèle simple modélisant la physique autour d'un nœud de Weyl présenté équation 1.10, on peut calculer la courbure de Berry d'un nœud. La courbure de Berry et plus généralement la Berryologie³ sont les briques élémentaires pour la dérivation des propriétés topologiques d'un système en physique des solides. Une façon intuitive de comprendre la phase de Berry est de se concentrer sur son origine : lorsqu'un système quantique (un électron de Bloch par exemple) voit ses paramètres changer *lentement* de valeurs dans le temps et faire une boucle dans l'espace des paramètres, l'état propre du système va acquérir une phase dite *géométrique*, la phase de Berry. Cette phase a des répercussions mesurables dans des quantités physiques comme les propriétés de transport et ce sont précisément ces répercussions qui forment les propriétés topologiques d'un système quantique. Le lecteur soucieux d'approfondir ses connaissances dans ce domaine peut se tourner vers le cours de Jean Dalibard au collège de France [19] ou à la revue de littérature [20].

Dans ce paragraphe, nous abordons rapidement les paradigmes sur lesquels repose la Berryologie. La courbure de Berry est donc directement reliée à l'évolution dans le temps des paramètres d'un Hamiltonien. Dans le cas où les paramètres de l'Hamiltonien $\mathbf{R}(t)$ évoluent de façon adiabatique dans le temps, les fonctions d'onde du système acquièrent deux phases distinctes : une phase dynamique qui dépend directement des énergies propres du système et une phase géométrique dont on a déjà parlé dans le paragraphe précédent et qui est sensible aux fonctions d'onde du système. Mathématiquement, cette dernière phase se traduit par l'expression :

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{R}) = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot i \langle n(\mathbf{R}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle, \quad (1.11)$$

où n est l'indice de bande du système. La phase géométrique nous renseigne donc sur l'évolution qu'a ressentie le système lorsque ses paramètres ont suivi le chemin \mathcal{C} . Dans la

3. Neologisme regroupant les concepts dérivés par Berry [18] c'est-à-dire la connexion, la courbure et la phase de Berry.

littérature scientifique, \mathcal{A}_n est appelée la connexion de Berry. Cet objet n'est pas invariant de jauge et c'est pour cela qu'on lui préférera son rotationnel, la courbure de Berry. Cette dernière est beaucoup plus simple à manier car il s'agit d'une quantité locale qui ne dépend pas de la jauge choisie. Dans le cas du système 1.10, il peut être montré que la courbure de Berry s'écrit [20] :

$$\Omega(\mathbf{k}) = \frac{\chi}{2(\hbar v_F)^2} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|^3}. \quad (1.12)$$

Le fait que la courbure de Berry soit dérivée du rotationnel d'une quantité dépendante de jauge et sa forme 1.12 qui ressemble beaucoup à un champ électrique venant d'une charge électrique mène souvent à faire une analogie de la courbure de Berry avec *un champ magnétique dans l'espace réciproque créé par un monopole magnétique*. Le monopole magnétique étant le nœud de Weyl, on peut s'intéresser à la charge magnétique associée à ce nœud. En utilisant la formule de Gauss-Ostrogradsky et en intégrant sur une surface \mathcal{S} englobant le nœud, on obtient :

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{S}} d\mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \Omega(\mathbf{k}) = \chi. \quad (1.13)$$

Ainsi, la chiralité χ d'un nœud est la charge associée à un nœud de Weyl.

Cette analogie nous permet de comprendre simplement pourquoi les nœuds de Weyl apparaissent toujours par paire de nœuds de chiralité opposée. Imaginons un matériau réel caractérisé par un seul nœud de Weyl dans sa première zone de Brillouin. En fonction de sa chiralité, il existe un flux de courbure de Berry sortant ou rentrant hors de la zone de Brillouin. Or, cela va à l'encontre de la périodicité de cette dernière. Pour sortir de cette situation absurde, rajouter un nœud de Weyl de chiralité opposée de telle sorte que le flux total de courbure de Berry soit nul suffit. Ce résultat est aussi connu sous le nom de théorème de Nielsen-Ninomiya [21, 22].

De plus, le modèle jouet 1.10 nous renseigne aussi sur une propriété remarquable des nœuds de Weyl : leur robustesse face aux perturbations. En effet, l'Hamiltonien 1.10 malgré sa grande simplicité utilise les trois matrices de Pauli. Comme toutes les perturbations non-interagissantes respectant la symétrie sous translation eainsi que conservant le nombre de particules peuvent s'écrire comme une combinaison linéaire de matrices de Pauli qui, avec l'identité, forment une base complète pour les matrices hermitiennes 2×2 , les perturbations ne font que déplacer la position des nœuds de Weyl dans l'espace réciproque et en énergie. Ainsi, dans le paradigme de deux nœuds de Weyl de chiralité opposée dans la zone de Brillouin, une des rares façons d'ouvrir un gap serait de fusionner entre eux les nœuds avant de pouvoir ouvrir un gap. Bien évidemment, ce scénario ne prend pas en compte une éventuelle transition de phase avec brisure de symétrie dans le matériau (supraconductivité, antiferromagnétisme, etc.) ou des interactions de type Hubbard.

1.1.3 Semi-métaux de Weyl et champ magnétique

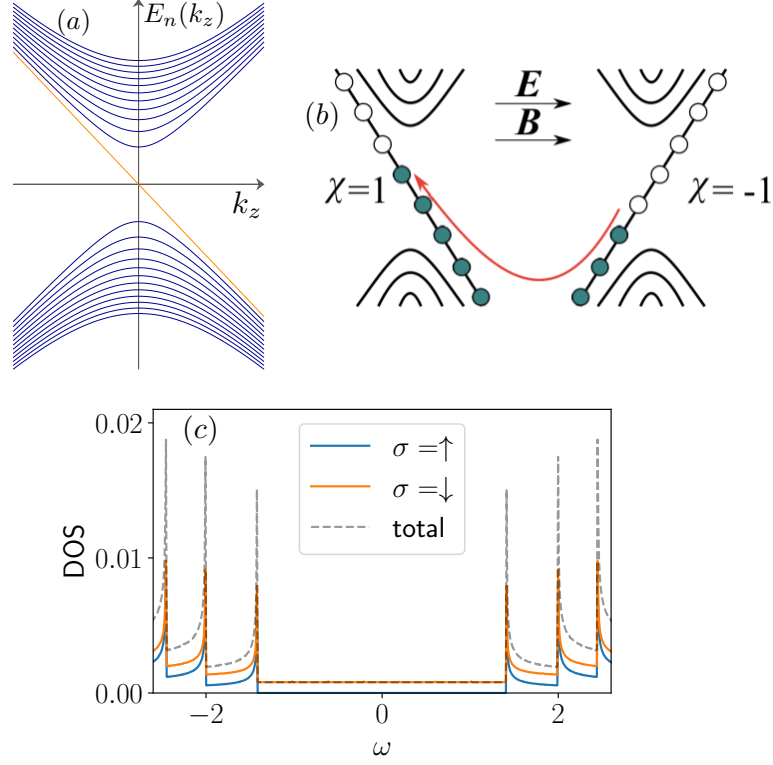


FIGURE 1.1 a) Dispersion d'énergie d'un nœud de Weyl soumis à un champ magnétique le long de la direction z . La chiralité du nœud est égale à $+1$ et les constantes physiques (\hbar, v_F et B) sont fixées à un. b) Dispersion d'énergie de deux nœuds de chiralité opposée. En présence d'un champ électrique parallèle au champ magnétique, on assiste à un dépeuplement des nœuds de chiralité négative et d'un peuplement des nœuds de chiralité positive. Cette figure est tirée de l'article [23]. c) Densités d'états partielles et totale d'un nœud de Weyl en présence d'un champ magnétique. Cette figure est à comparer avec la figure 1.1(a) puisqu'elle correspond à la densité du même nœud. La base des spins a été choisie. On remarque que la densité d'états correspondant aux spin \uparrow , c'est-à-dire la première composante du ket 1.17, est nulle indiquant aucune contribution de la part du niveaux chiral.

La notion de chiralité s'exprime de façon intéressante lorsque l'on prend en compte l'effet orbital induit par un champ magnétique uniforme dans un semi-métal de Weyl. Une prise en compte fidèle des effets induits par un champ magnétique externe passe aussi par la prise en compte de l'effet Zeeman. Dans un modèle jouet comme celui présenté équation 1.10, l'effet Zeeman va essentiellement modifier la position des nœuds de Weyl dans la zone de Brillouin. Dans la suite de cette sous-section et par soucis de simplicité, nous ne tiendrons compte que de l'effet orbital induit par le champ magnétique sur les électrons en partant du modèle jouet de l'équation 1.10 auquel on ajoute un champ magnétique externe le long de la direction z . Dans ce cas, k_z reste un bon nombre quantique et le système sera vraiment

affecté le long du plan perpendiculaire à celui du champ magnétique. Sans rentrer dans les détails de la dérivation, les énergies propres du système sont [23] :

$$E_n = \pm v_F \sqrt{2\hbar e B |n| + (\hbar k_z)^2} \text{ pour } n > 0. \quad (1.14)$$

$$E_0 = -\chi \hbar v_F k_z \text{ pour } n = 0, \quad (1.15)$$

où e est la charge de l'électron et B la norme du champ magnétique et n est un entier qui représente l'indice du niveau de Landau. Le formalisme utilisé dans la suite de cette sous-section est en tout point similaire au formalisme utilisé pour les niveaux de Landau dans le cas d'une dispersion quadratique des électrons [24]. Ainsi, le lecteur ne sera pas étonné de retrouver les indices associés à un niveau de Landau, l'opérateur nombre composé d'opérateurs d'échelle $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, ainsi que ses états propres associés à un indice de Landau n .

Ces énergies ont la même dégénérescence que les niveaux de Landau *conventionnels*, c'est-à-dire proportionnelle à la section S du matériau orthogonale au champ magnétique. De façon plus mathématique, la dégénérescence des niveaux d'énergies est

$$\frac{SeB}{2\pi\hbar c}. \quad (1.16)$$

Ainsi, les énergies E_n avec $n \neq 0$ correspondent aux niveaux de Landau d'un semi-métal tri-dimensionnel. On remarque qu'ils n'ont aucune signature de la chiralité à la différence du niveau de Landau associé à l'indice 0 qui est directement proportionnel à cette dernière. Ce niveau particulier est souvent appelé *niveau de Landau chiral* car sa pente en k indique directement la chiralité du nœud de Weyl. Ces remarques sont illustrés grâce aux figures 1.1(a) et (b) qui montrent la dispersion d'énergie d'un nœuds soumis à un champ magnétique externe.

Attardons nous quelque peu sur la fonction d'onde de ce niveau chiral. Ce dernier peut s'écrire à l'aide des spineurs comme suit :

$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Les deux composantes de ce vecteur sont bien évidemment différentes. La première est le chiffre zero alors que la seconde est l'état propre associé à l'indice 0 de l'opérateur nombre \hat{N} .

Cette différence entre les deux composantes implique un "déséquilibre" entre les densités

d'états partielles du système. La figure 1.1 représente les deux densités d'états partielles ainsi que la densité d'états totale du système. On remarque directement la contribution du niveau chiral caractérisée par une densité d'états constantes dans l'une d'entre elle et son absence dans l'autre. Nous verrons dans le chapitre 6 les implications de ce déséquilibre.

1.2 Propriétés de transport remarquables : magnétorésistance négative et effet Hall anormal

1.2.1 Effet Hall anormal

Nous n'entrerons pas dans cette sous-section sur la physique et les mathématiques derrière l'effet Hall anormal dans les semi-métaux de Weyl puisqu'une bonne introduction de cela peut se retrouver dans la section 4.1 de cette thèse. Il est cependant important et intéressant de s'attarder dans ce chapitre sur l'existence d'un effet Hall anormal, c'est-à-dire l'existence d'une conductivité transverse à un champ électrique, dans les semi-métaux de Weyl. Cette propriété n'est pas spécifique à ces matériaux, mais son aspect topologique est une possible sonde pour prouver l'existence de nœud de Weyl dans le volume d'un échantillon. En effet, comme ces derniers peuvent être vus comme des monopoles de courbure de Berry dans l'espace réciproque et qu'ils sont présents par paires de chiralité positive et négative, il existe dans la zone de Brillouin du matériau des empilements d'isolants de Chern bidimensionnels. Ces isolants sont caractérisés par la présence d'un nombre de Chern non nul défini mathématiquement comme le flux de la courbure de Berry sur leur surface :

$$C = \frac{1}{2\pi} \iint_S d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}). \quad (1.18)$$

C'est la topologie des isolants de Chern qui est à l'origine d'un effet Hall anormal topologique [25]. Lorsque la présence de symétries dans le matériau ne prévient pas l'apparition de cet effet, la présence d'une conductivité de Hall anormale non nulle et indépendante de la température peut être avancée comme une preuve indirecte de l'existence de nœuds de Weyl ou du moins d'une topologie non triviale dans l'échantillon.

1.2.2 La magnétorésistance négative

La présence du niveau de Landau chirale a aussi de lourdes répercussions sur les propriétés de transport. La plus remarquable reste sans conteste l'anomalie chirale et sa conséquence mesurable, la magnétorésistance négative.

L'anomalie chirale, aussi appelée anomalie d'Adler-Bell-Jackiw, peut être démontrée théoriquement de différentes façon dans les semi-métaux de Weyl. Cela peut être fait à l'aide de la théorie des champs [26, 27], de la théorie des bandes électroniques [28] ou encore avec une théorie semi-classique se basant sur l'équation de Boltzman [29]. Cette anomalie se caractérise par la non-conservation du nombre de fermions chiraux au niveau d'un nœud de Weyl lorsque un champ électrique et magnétique parallèles entre eux sont appliquées sur le matériaux. En adoptant la notation de Son et Spivak dans leur approche semi-classique [29], cela se traduit par l'équation :

$$\frac{\partial N^{(i)}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}^{(i)} = \chi^i \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar^2 c} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}) + \mathcal{I}_{coll}, \quad (1.19)$$

où \mathbf{E} et \mathbf{B} représentent respectivement les champs électrique et magnétique, $N^{(i)}$ est le nombre de porteur de charge au niveau du $i^{\text{ème}}$ nœud de Weyl, $\mathbf{j}^{(i)}$ est la densité de courant associé à ce nœud, χ^i sa chiralité et, enfin, où le terme \mathcal{I}_{coll} modélise le type de collisions présentes dans le système. On remarque que même en l'absence de collisions dans le système, lorsque le produit scalaire entre les champs électrique et magnétique est non nul, le nombre de porteurs de charge au niveau d'un nœud de Weyl n'est pas conservé. Bien évidemment, cette anomalie n'est valable que pour un nœud de Weyl isolé et le fait que la somme des chiralités s'annule dans un semi-métal de Weyl lève le problème que soulève l'anomalie. Dans les faits, le dépeuplement des fermions de Weyl d'un nœud de Weyl de chiralité négative s'accompagne systématiquement du peuplement d'un nœud de chiralité positive comme cela est illustré dans la figure 1.1(b).

Une des conséquences les plus connues de la présence d'une anomalie chirale dans un matériau est la magnétorésistance négative. En effet, puisque les nœuds de Weyl sont séparés dans l'espace réciproque, le déséquilibre de charge créé par le terme en $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ requière des processus de diffusion associés à de grands moments. Lorsque le matériau est suffisamment propre, ces processus de diffusion sont faibles et par conséquent le temps de demi-vie des porteurs de charge est grand. Ainsi, d'un point de vue du transport, l'anomalie chirale entraîne le fait que la conductivité longitudinale le long de la même direction que le champ magnétique appliqué est extrêmement grande. Au moins dans la limite quantique où le champ magnétique appliqué est suffisamment fort pour séparer significativement les

niveaux de Landau chiraux avec les autres niveaux et donc où on peut considérer que seuls les niveaux chiraux sont peuplés, la conductivité est directement proportionnelle au champ magnétique du fait de la dégénérescence des bandes [29]. Ce qui implique une magnétorésistance négative c'est-à-dire que la conductivité augmente avec le champ magnétique.

De manière moins imagée, il a été montré qu'à faible champ magnétique, la conductivité longitudinale le long de la même direction du champ est proportionnelle au carré de l'amplitude de \mathbf{B} [29]. Ce comportement laisse place à une conductivité proportionnelle au champ magnétique dans la limite quantique.

1.3 Découvertes expérimentales

Jusqu'à présent les propriétés générales des semi-métaux de Weyl ont été présentées d'un simple point de vue théorique. Un aspect de superficialité ressort d'autant plus que nous avons dérivé ces propriétés en utilisant des modèles jouets sur lesquels nous avons appliqué un grand nombre d'approximation (modèle effectif, absence d'interaction, etc.). Pourtant, la recherche sur les semi-métaux de Weyl a été stimulée récemment grâce à des découvertes expérimentales qui ont permis de sortir des calculs analytiques et des abstractions numériques.

1.3.1 Les matériaux non-centrosymétriques : TaAs, NaAs, NaP

Pour guider les preuves expérimentales, la recherche de semi-métaux de Weyl dans des matériaux réels a d'abord reposé sur des calculs *ab-initio* de structure de bande. Cette tâche n'est pas facile car si des nœuds de Weyl sont présents dans la structure de bande, ils ne se trouvent pas forcément à des points de symétries puisque leur existence vient de dégénérescences accidentelles des bandes électroniques. Il faut donc avoir une grande précision dans l'espace des moments pour explorer la zone de Brillouin tri-dimensionnelle, ce qui a un coût numérique conséquent.

A partir de 2011, il a d'abord été proposé que des phases de semi-métaux de Weyl puissent exister dans des iridates de pyroclore [31] ou des matériaux ferromagnétiques comme HgCr_2Se_4 [32]. Ces matériaux ont la particularité de briser la symétrie par renversement du temps grâce à une phase magnétique. A ce jour, aucune preuve expérimentale directe n'a été apportée sur ces composés.

En 2015, la recherche s'est dirigée vers des semi-métaux de Weyl qui brisent la symétrie par inversion en explorant une famille de matériaux non centro-symétrique à base de métaux

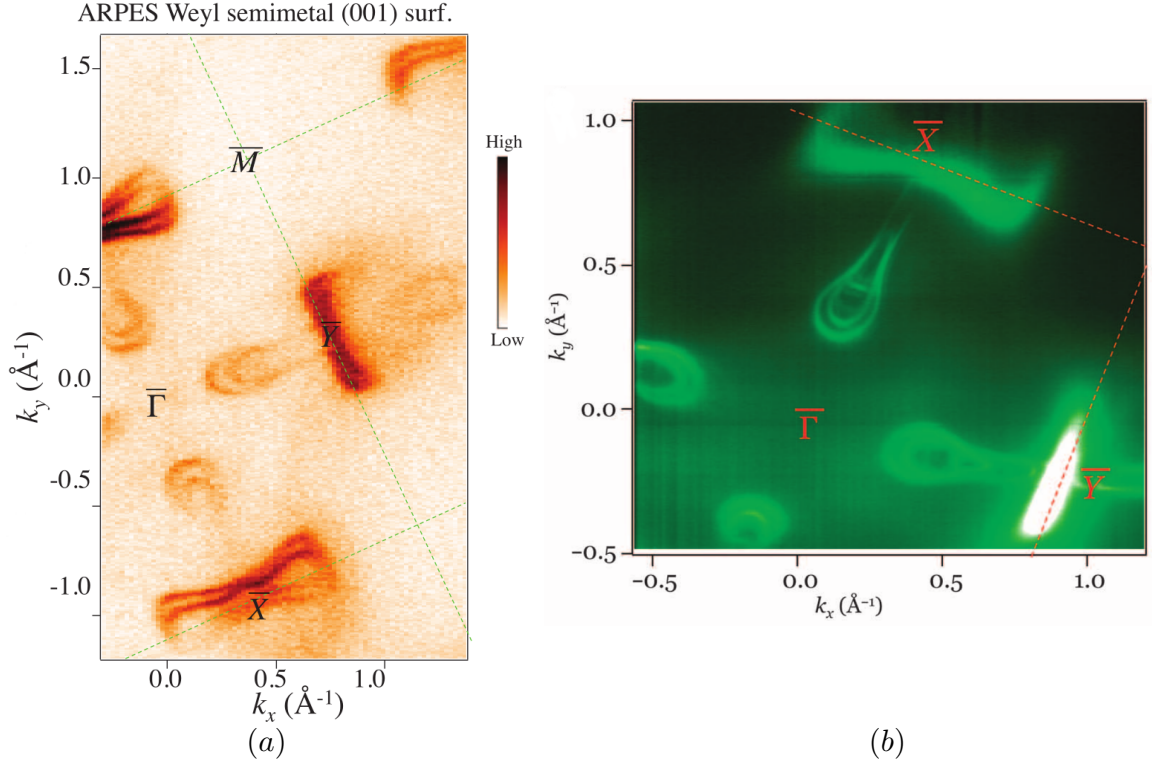


FIGURE 1.2 Exemple de mesures ARPES faites sur TaAs (a) et sur TaP (b). Les états de surface en arc de Fermi sont reconnaissables par leur forme d'ampoule. Pour vérifier si une chiralité bien définie existe dans l'échantillon, une méthodologie a été développée dans [30]. Images tirées respectivement de [10] et de [12].

de transition monophosphurés (Tantale *Ta* ou le niobium *Nb* avec de l'arsenic *As* ou du phosphore *P*) [33, 34]. Il est alors prédit théoriquement que TaAs, TaP et NbP contiennent 12 paires de nœuds de Weyl dans leur zone de Brillouin. Ces prédictions théoriques ont permis d'obtenir des preuves expérimentales solides qui reposent sur des mesures de transport et de spectroscopie photoélectronique résolue en angle (ARPES, de l'anglais *Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy*) en surface [8, 9, 10, 7, 11, 12].

Pour affirmer la présence d'une phase de semi-métal de Weyl dans un matériaux, il est souvent avancé la présence d'une magnétorésistance négative anisotrope (c'est-à-dire qui dépend de l'angle entre les champs magnétique et électrique) dans l'échantillon. La mesure de ce phénomène apporte une preuve indirecte sur la présence de nœuds de Weyl avec une chiralité bien définie dans la zone de Brillouin car d'autres physiques peuvent expliquer ce phénomène [35]. Cette magnétorésistivité négative est néanmoins une bonne indication pour statuer de la phase de semi-métal de Weyl dans un matériaux et a été observée dans TaAs [33] et TaP [36].

La solidité de ces preuves réside sur le fait qu'elles se basent sur des mesures directes de la topologie particulière des semi-métaux de Weyl. En effet, la présence de monopole de courbure de Berry dans le volume du système à pour conséquence l'apparition d'états de surface en arcs de Fermi. Dans l'espace réciproque, ces arcs sont un continuum d'états surface qui relient la projection de nœuds de Weyl de chiralités opposées. Alors que les états de surface forment généralement un contour fermé dans l'espace réciproque, ces arcs de Fermi sont précisément caractérisés par un contour ouvert (d'où le terme *arc*). Leur présence renseigne donc directement sur l'existence de nœuds de Weyl de chiralités bien définies et séparées dans l'espace des moments. L'ARPES est la technique de choix pour sonder la présences de ces états sur la surface d'un échantillon.

Tous les membres de cette famille de matériaux présentés dans l'article [34] présentent les mêmes arcs de Fermi caractérisés par leur forme en ampoule électrique (cf. Figure 1.2). A l'aide d'une méthodologie particulière [30], il est théoriquement possible de savoir si ces arcs de Fermi en forme d'ampoule correspondent ou non à la présence d'une chiralité bien définie. Malheureusement, la résolution en énergie des mesures d'ARPES n'est parfois pas suffisamment fine pour statuer sur la présence ou non d'une topologie de Weyl dans les matériaux car les nœuds doivent être suffisamment proches de la surface de Fermi pour pouvoir voir une manifestation de leur physique. Enfin, il est intéressant de remarquer la forme si particulière des arcs de Fermi de ces matériaux, preuve des grandes simplifications qui sont faites dans les modèles théoriques.

L'effet du couplage spin-orbite est crucial dans la présence d'une topologie non triviale dans ces matériaux [37]. En combinant les résultats ARPES avec des expériences d'oscillations quantiques, il est possible d'obtenir les détails sur la localisation de l'énergie de Fermi par rapport aux nœuds de Weyl. Ainsi, si ces trois matériaux ont une structure de bande similaire, l'intensité du couplage spin-orbite est différente. A la lumière d'expériences d'oscillations quantiques, NbP [38] et TaP [36] ne devraient pas exhiber une physique de Weyl à la différence de TaAs. Le conditionnel est utilisé ici car des preuves indirectes propres à la physique de Weyl comme la magnétorésistance négative ont été trouvées dans TaP par exemple [36]. Ainsi, la question de la manifestation de la physique de Weyl reste ouverte expérimentalement. Peut-on parler de semi-métaux de Weyl dans les TaP et NbP? La magnétorésistance négative mesurée dans ces matériaux est-elle vraiment reliée à l'anomalie chirale?

1.3.2 D'autres candidats : $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ et Mn_3Sn

Comme discuté plus tôt, la recherche d'une phase de semi-métal de Weyl dans des matériaux réels a rencontré un certain succès avec la famille des matériaux non centro-

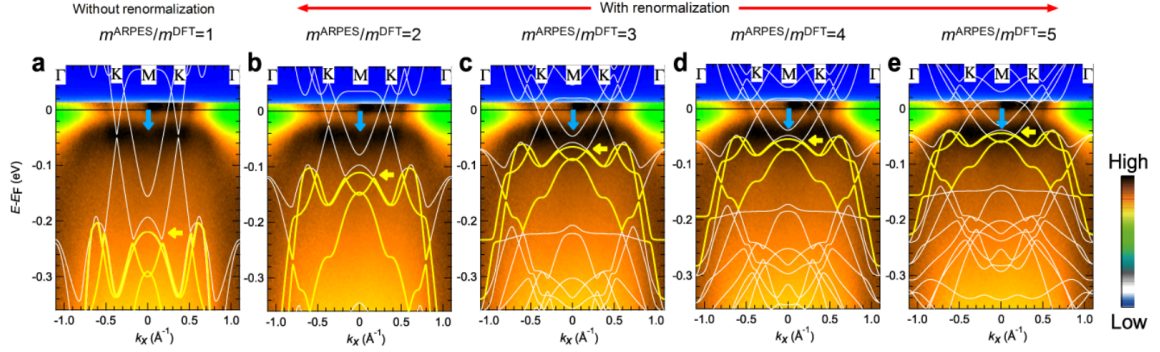


FIGURE 1.3 Comparaison entre les expériences ARPES et les calculs *ab-initio* en faisant varier la masse effective des électrons dans Mn_3Sn . Un rapport cinq entre les masses issues de mesures ARPES et des calculs DFT est nécessaire pour obtenir un certain accord entre le calcul numérique et les mesures expérimentales. Figure tirée du matériel supplémentaire de [39]

symétriques à base de métaux de transition monophosphurés alors que cette quête avait commencé sur des matériaux magnétiques qui brisent la symétrie par renversement du temps.

Récemment, des preuves expérimentales indirectes ont été fournies pour deux matériaux magnétiques ayant une géométrie de réseau en kagomé en couche : $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ et Mn_3Sn .

$\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ est un ferro-aimant dont les calculs *ab-initio* prenant en compte le couplage spin-orbite semblent indiquer la présence d'une paire de nœuds de Weyl proche du niveau de Fermi [40]. Ces calculs semblent être confirmés par les mesures ARPES en volume. De plus, les propriétés de transport propres à la topologie des semi-métaux de Weyl apportent aussi des preuves indirectes. En effet, ce matériau exhibe une magnétorésistance négative en B^2 ainsi qu'un important effet Hall anormal dont les origines pourraient être la présence de nœuds de Weyl dans le volume de l'échantillon. En effet, cette conductivité transverse devient indépendante de la température en dessous de 100 K et est indépendante de la conductivité longitudinale. Ces deux faits expérimentaux sont attendus d'un effet Hall anormal dont l'origine serait topologique.

Mn_3Sn est quant à lui un antiferro-aimant avec un ferromagnétisme faible qui présente les mêmes propriétés de transport que $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$, c'est-à-dire, une magnétorésistance négative [39] ainsi qu'un effet Hall anormal extrêmement important qui se mesure même à température ambiante [41]. En plus de nœuds de Weyl au niveau de l'énergie de Fermi, Mn_3Sn présente surtout la particularité de nécessiter une renormalisation importante de la masse des quasi-particules pour avoir une bonne correspondance entre les calculs de premiers principes et les mesures ARPES [39], comme on peut le voir dans la figure 1.3. Cette nécessité est la signature de la présence de corrélations électroniques importantes, ce

qui rend ce matériau extrêmement intéressant pour étudier l'effet des corrélations sur les propriétés topologiques des semi-métaux de Weyl. Il est aussi une preuve expérimentale que des matériaux corrélés peuvent exhiber une physique de Weyl.

1.4 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons introduit les grands concepts de la physique des semi-métaux de Weyl. En partant des solutions de l'équation de Dirac, on arrive à obtenir l'Hamiltonien d'un cône de Dirac. Ce dernier est défini par des bandes linéaires doublement dégénérées qui se croisent en un point qui est quatre fois dégénéré. En trois dimensions, la brisure de la symétrie d'inversion ou de la symétrie par renversement du temps lève la dégénérescence des bandes électronique du semi-métal de Dirac et crée des nœuds de Weyl : points dans l'espace réciproque où deux bandes électroniques linéaires et non dégénérées se croisent.

Ces nœuds de Weyl portent en eux un nombre quantique pouvant prendre les valeurs ± 1 et que l'on appelle chiralité. De plus, par théorème, ils apparaissent par paire de nœuds de chiralité opposée dans la première zone de Brillouin. En effet, les nœuds de Weyl peuvent être vus comme des monopoles de courbure de Berry dont la charge est égale à leur chiralité. Par périodicité, le flux de cette courbure de Berry sur une surface "entourant" la zone de Brillouin doit être nul, ce qui impose un nombre égal de charges positives et négatives dans la zone de Brillouin d'un semi-métal de Weyl. Ce résultat est connu sous le nom de théorème de Nielsen-Ninomiya.

La notion de chiralité prend un sens particulier lorsque l'on soumet un semi-métal de Weyl à un champ magnétique. Autour d'un nœud de Weyl, la dispersion d'énergie se retrouve alors profondément modifiée avec notamment l'émergence de niveaux de Landau chiraux. Ces derniers sont caractérisés par une dispersion unidimensionnelle et dont la pente est directement reliée à la chiralité du nœud. Lorsque l'on calcule les équations de conservation de porteurs de charge au niveau d'un nœud de Weyl soumis à des champs magnétique et électrique non orthogonaux, on remarque que les fermions de Weyl ne sont pas conservés. Ainsi, selon la chiralité du nœud, on assiste soit à un peuplement soit à un dépeuplement des porteurs de charge. Ce résultat connu sous le nom d'anomalie chirale n'est pas aussi anormal que son nom laisse entendre dans les semi-métaux de Weyl réels puisque le peuplement d'un nœud s'accompagne forcément par le dépeuplement d'un autre nœud et *in fine* les électrons sont conservés globalement.

L'intérêt de la communauté scientifique pour les semi-métaux de Weyl réside essentiellement sur les propriétés topologiques qu'exhibent théoriquement ces matériaux. Les conséquences de cette topologie non triviale devraient se mesurer aisément dans les propriétés de transport. Ainsi, du fait de leur dimension et de la présence d'une courbure de Berry bien définie, les semi-métaux de Weyl devraient exhiber un effet Hall anormal topologique. De plus, l'existence de niveaux de Landau chiraux devraient entraîner une magnétorésistance négative. Ainsi, malgré le fait que ces phénomènes ne peuvent qu'être seulement interprétés comme des preuves indirectes de l'existence d'une physique de Weyl dans un matériau, ils peuvent étayer des conclusions expérimentales.

Expérimentalement parlant, les semi-métaux de Weyl ont connu une *annus mirabilis* en 2015 avec la prédiction théorique suivie par des preuves expérimentales de nœuds de Weyl dans une famille de matériaux non centro-symétrique à base de métaux de transition monophosphurés. Ces derniers exhiberaient 24 nœuds de Weyl grâce à la brisure de la symétrie par inversion. Une façon de prouver expérimentalement la présence d'une chiralité bien définie dans le volume d'un matériau est de vérifier la présence d'états de surface en arc de Fermi. Dans l'espace réciproque, ces arcs de Fermi relient la projection de deux nœuds de Weyl sur la surface d'un échantillon. Cette observation, bien que ardue dans des matériaux réels du fait de la complexité géométrique des états de surface est une preuve solide et directe de la présence d'une physique de Weyl dans le volume d'un échantillon. A ce jour, c'est l'arséniure de tantale TaAs qui présente le plus de preuves indiquant la présence d'une phase de semi-métal de Weyl dans son volume.

La quête de semi-métaux de Weyl brisant la symétrie par renversement du temps reste encore ouverte. Malgré quelques candidats solides qui présentent des bandes électroniques linéaires ainsi que des conséquences de la topologie (Effet Hall anormal et magnétorésistance négative en tête) similaires à ceux d'un semi-métal de Weyl, l'absence de preuves directes est un bémol qui empêche tout consensus sur la question. On peut néanmoins citer $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ et Mn_3Sn qui présentent des propriétés de transport en accord avec la théorie des semi-métaux de Weyl ainsi qu'une certaine adéquation entre les calculs *ab-initio* prédisant des nœuds de Weyl et des mesures d'ARPES en volume.

Chapitre 2

La théorie du champ moyen dynamique

Introduction

Les découvertes des fermions lourds [42] et des supraconducteurs à haute température critique [43] ont poussé à l'urgence le développement de méthodes systématiques pour étudier les matériaux fortement corrélés. En effet, dans les années 80, même les Hamiltoniens jouets les plus simples comme le modèle de Hubbard ou le modèle de réseau de Kondo n'avaient pas de solution exacte pour des dimensions supérieures à une. Pour les dimensions deux et trois, il existait certes des méthodes approximatives (la resommation de diagramme de Feynman, par exemple), mais ces dernières souffraient de l'absence d'une *limite contrôlée* dans le sens que lui ont donné Antoine George *et al.* dans l'article [44], c'est-à-dire, une limite vers laquelle le système se simplifie et peut être alors résolu de façon contrôlée. Au début des années 90, en se basant sur une compréhension plus fine de la limite de la dimension infinie du modèle de Hubbard initiée par Metzner et Vollhardt en 1989 [45], Antoine Georges et Gabriel Kotliar [46] et indépendamment Mark Jarrel [47] développent la théorie du champ moyen dynamique (DMFT, de l'anglais *Dynamical mean-field theory*) [46].

Comme nous le verrons dans ce chapitre, cette théorie, applicable (et appliquée) sur des systèmes de dimension deux et trois, présente l'avantage d'avoir une limite contrôlée lorsque la dimensionnalité du système devient infinie. Elle a aussi permis un grand nombre d'avancées dans le domaine des interactions fortes en permettant l'étude systématique de transitions de phase dues aux interactions comme la célèbre transition métal-isolant de Mott.

Ce chapitre s'intéresse à cette théorie en détail : la section 2.1 introduit rapidement le formalisme nécessaire pour appréhender la physique des électrons fortement corrélés. On discutera dans la section 2.2 du modèle d'Hubbard, modèle utilisé tout au long de ce travail de thèse pour rendre compte des interactions et qui sert de brique élémentaire dans la définition de la DMFT. Dans la section 2.3, les équations de la DMFT sont dérivées. Enfin, la section 2.4 présente le modèle d'impureté d'Anderson et les sections 2.5 et 2.6 sont consacrées à deux solutionneurs d'impureté permettant d'appliquer la DMFT : la théorie de la perturbation itérée et la diagonalisation exacte.

2.1 Méthodologie

Avant de rentrer dans des calculs avancés, il est important de rappeler le formalisme mathématique que l'on utilisera dans la suite de cette thèse. Le lecteur intéressé par l'origine de cette partie pourra se référer aux notes de cours du professeur Tremblay [48]. Les unités naturelles sont choisies pour les définitions physiques.

2.1.1 Définition à temps et fréquences réelles

L'une des briques essentielles à la construction de solutions à des problèmes à N-corps sont les fonctions de Green. À la différence de la fonction d'onde d'un problème quantique qui contient l'ensemble des informations du système, les fonctions de Green ne contiennent que certaines informations dites «importantes». Il existe plusieurs définitions de fonction de Green, mais nous commencerons par la fonction de Green retardée à un corps en temps réel :

$$G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') = -i\theta(t - t') \langle \{ \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}, t), \hat{c}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t') \} \rangle. \quad (2.1)$$

θ est la fonction d'Heaviside et $\hat{c}^{(\dagger)}$ est l'opérateur de destruction (création) fermionique. Enfin, la moyenne $\langle \dots \rangle$ est la moyenne thermodynamique dans l'ensemble grand canonique et $\{ \hat{A}, \hat{B} \}$ l'anti-commutation entre les opérateurs \hat{A} et \hat{B} . Cette définition de la fonction de Green est valable pour des particules fermioniques. Dans le cas de particules bosoniques, outre le remplacement des opérateurs \hat{c} et \hat{c}^\dagger par des opérateurs bosoniques, l'anti-commutation sera remplacée par une commutation.

L'évolution temporelle des opérateurs quantiques est basée sur la représentation d'Heisenberg, c'est-à-dire que l'on a, lorsque le système est gouverné par l'Hamiltonien \hat{H} :

$$\hat{O}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{O} e^{-i\hat{H}t}. \quad (2.2)$$

D'un point de vue physique, on peut voir la fonction de Green retardée (ou plutôt sa partie imaginaire) comme suit : il s'agit de l'amplitude de probabilité de créer au temps t une particule fermionique de spin σ à la position \mathbf{r} , de la laisser se propager dans l'espace-temps et qu'elle se soit «transformée» en une particule de spin σ' à la position \mathbf{r}' au temps t' (où $t < t'$, d'où l'appellation «retardée»). Lorsque l'on aura affaire à des fonctions de Green en fréquences réelles, on omettra dorénavant l'indice R car elles correspondront, sauf cas contraire, à des fonctions de Green retardées.

2.1.2 Cas d'un système invariant par translation

La définition mathématique peut être amenée à des formes plus simples à manipuler lorsqu'il existe dans le système un certain nombre d'invariances et de symétries. En effet, si le système est invariant par translation, ce qui se traduit mathématiquement par le fait que la fonction de Green ne dépende que du vecteur distance $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, il est plus simple de travailler directement dans l'espace réciproque, la fonction de Green devenant :

$$G(\mathbf{k}, \sigma, \sigma', t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{ \hat{c}_\sigma(\mathbf{k}, t), \hat{c}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t') \} \rangle. \quad (2.3)$$

De plus, en remarquant que la fonction de Green à un corps ne dépend que de $t - t'$, on peut travailler en fréquences réelles en prenant une transformée de Fourier temporelle. Cette transformation suit la définition mathématique suivante dans le cas de la fonction de Green retardée :

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega(t-t')} e^{-\eta t} G(t - t', \mathbf{k}) \quad (2.4)$$

où η est un nombre réel *positif* infinitésimalement petit. Ce rajout semble artificiel, mais est nécessaire pour la convergence de la transformée de Fourier ainsi que pour respecter la causalité de la fonction de Green.

L'utilisation des fréquences réelles est très pratique. Elles nous permettent de définir la fonction spectrale qui nous renseigne sur les excitations des particules du système en fonction de l'énergie (grâce à la conversion : $\epsilon = \hbar\omega$) :

$$A_{ij}(\omega) = -2\text{Im}G_{ij}(\omega) \quad (2.5)$$

ainsi que la densité d'états du système :

$$N(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr} [\text{Im}\mathbf{G}(\omega)]. \quad (2.6)$$

Nous réutiliserons ces définitions dans la suite de ce travail de thèse.

2.1.3 Équation du mouvement dans le cas d'un Hamiltonien quadratique

À partir de la fonction de Green 2.1, on peut «s'amuser» à calculer l'équation du mouvement de la fonction de Green dans le cas d'un Hamiltonien quadratique :

$$\hat{H} = - \sum_{\alpha, \beta} t_{\alpha\beta} \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\beta}. \quad (2.7)$$

Dans ce cas particulier, il peut être montré que dans la représentation d'Heisenberg, la dérivée temporelle de l'opérateur de destruction suit la formule suivante :

$$i \frac{\partial c_i}{\partial t} = - \sum_{\beta} t_{i\beta} c_{\beta}. \quad (2.8)$$

En utilisant la dérivée temporelle $i\partial_t$ sur la formule 2.1, on obtient :

$$\sum_{\beta} \left(i\delta_{i\beta} \frac{\partial}{\partial t} + t_{i\beta} \right) G_{\beta j}(t, t') = \delta(t - t') \delta_{i,j} \quad (2.9)$$

où encore, en fréquence réelle :

$$(\omega + i\eta) G_{ij}(\omega) = \delta_{ij} - \sum_{\beta} t_{i\beta} G_{\beta j}(\omega). \quad (2.10)$$

Cette équation nous sera fort utile dans la dérivation des équations de la DMFT présentée la section suivante.

2.1.4 Un outil mathématique pour les température finie : Les fréquences de Matsubara

Les définitions précédentes sont valables en présence ou non d'interaction et quelle que soit la température du système. Cependant, lorsque l'on travaille à une température finie T , il est bien plus simple mathématiquement d'utiliser les fréquences de Matsubara plutôt que les fréquences réelles. On définit la fonction de Green en temps imaginaire comme suit :

$$G_{ij}(\tau, \tau') = - \langle \mathcal{T}_{\tau} \hat{c}_i(\tau) \hat{c}_j^{\dagger}(\tau') \rangle. \quad (2.11)$$

Les indices i et j représentent les nombres quantiques sur lesquels on travaille et \mathcal{T}_τ est l'opérateur chronologique temporel en temps imaginaire τ . Cette écriture se base sur une extension en temps imaginaire de la représentation d'Heisenberg où l'on a substitué it par τ :

$$\hat{\mathcal{O}}(\tau) = e^{\tau \hat{H}} \hat{\mathcal{O}} e^{-\tau \hat{H}}. \quad (2.12)$$

La réécriture de la fonction de Green vue dans l'équation 2.11 implique un certain nombre de propriétés de périodicité dont on ne fera pas la démonstration ici mais qui méritent d'être présentées :

$$G_{ij}(\tau + 2\beta) = G_{ij}(\tau) \quad (2.13)$$

$$G_{ij}(\tau + \beta) = \pm G_{ij}(\tau), \quad (2.14)$$

où β est l'inverse de la température $\beta = 1/T$ et où le signe de la seconde équation dépend de la nature des particules en jeu dans le système. Un signe $+$ signe une nature bosonique tandis qu'un signe $-$ marque le caractère fermionique des particules du système. Ces conditions de périodicité et d'anti-périodicité sont cruciales lorsque l'on veut définir un équivalent à la transformée de Fourier 2.4 pour des fonctions de Green définie en temps imaginaire. Pour passer du temps imaginaire aux fréquences de Matsubara, nous utilisons la définition suivante :

$$G_{ij}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{ij}(\tau), \quad (2.15)$$

avec $i\omega_n = 2i\pi Tn$ pour les bosons et $i\omega_n = i\pi T(2n + 1)$ pour les fermions. Ces fréquences de Matsubara respectent parfaitement les propriétés de périodicité présentées aux équations 2.13 et 2.14. Pour passer des fréquences de Matsubara aux fréquences réelles, il «suffit» de faire un prolongement analytique, c'est-à-dire de faire la substitution suivante $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$. Le mot «suffit» est entre guillemets car, si cette substitution ne pose aucun problème lorsque l'on dérive les équations analytiquement, cela devient extrêmement difficile lorsque cela est fait de façon numérique. Pour ce faire, l'utilisation de certaines méthodes comme la méthode des approximants de Padé [49, 50] (cf. Annexe B) ou la méthode du maximum d'entropie [51] est nécessaire.

2.1.5 L'équation de Dyson

Enfin, lorsque le système est en présence d'interaction, il est utile de présenter l'équation de Dyson. Cette dernière permet aussi d'introduire le concept de self-énergie. En effet, lorsque l'Hamiltonien peut se décomposer en deux parties : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{Int}$ où \hat{H}_0 est

l'Hamiltonien dit libre (sans interaction) et \hat{H}_{Int} , l'Hamiltonien de l'interaction, la self-énergie Σ peut être vue comme la correction aux effets de l'Hamiltonien libre \hat{H}_0 due à la présence des interactions. Cela se traduit par la célèbre équation de Dyson :

$$G_{ij}(\tau - \tau') = G_{ij}^0(\tau - \tau') + \sum_{\alpha\beta} \int d\tau_1 d\tau_2 G_{i\alpha}^0(\tau - \tau_1) \Sigma_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) G_{\beta j}(\tau_2 - \tau'). \quad (2.16)$$

G est la fonction de Green de l'Hamiltonien total \hat{H} et G^0 est la fonction de Green de l'Hamiltonien \hat{H}_0 . Ramenée au cas invariant par translation et en fréquences de Matsubara, la fonction de Green interagissante G s'écrit comme une fonction simple de la fonction de Green de l'Hamiltonien \hat{H}_0 et de la self-énergie :

$$G(i\omega_n, \mathbf{k}) = ([G^0(i\omega_n, \mathbf{k})]^{-1} - \Sigma(i\omega_n, \mathbf{k}))^{-1}. \quad (2.17)$$

Résoudre un problème avec des interactions revient donc finalement à calculer la self-énergie du système. En pratique, très peu de systèmes avec interaction peuvent être résolus exactement, rendant l'utilisation de méthodes approximatives nécessaire. La DMFT est légèrement différente de ces méthodes approximatives dans le sens où elle est, par construction, exacte dans la limite des grandes dimensions (la fameuse limite contrôlée). L'approximation en DMFT réside dans son utilisation sur des systèmes de basse dimension.

2.2 Aparté sur la physique du modèle d'Hubbard

Avant de plonger dans les équations de la théorie du champ moyen dynamique, il est intéressant de s'attarder sur le modèle que cette méthode résout ainsi que sur la physique qui lui est associée.

Proposé de façon indépendante par Gutzwiller [52], Kanamori [53] et Hubbard [54] en 1963 avec la volonté d'avoir un modèle simple qui rend compte des corrélations électroniques dans un solide, le modèle d'Hubbard peut se définir à l'aide de l'Hamiltonien suivant :

$$\hat{H} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}. \quad (2.18)$$

Ici, les indices i et j dénotent les sites du réseau et σ le spin de l'électron. t_{ij} et μ représentent respectivement les termes de sauts entre les sites i et j et le potentiel chimique. Les opérateurs $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ dénotent les opérateurs de densités. Enfin, la partie de l'Hamiltonien proportionnelle à U , le terme d'interaction de Hubbard, est là pour rendre compte des interactions coulombiennes écrantées dans le cristal. Ce terme d'interaction est purement

local dans le sens où deux électrons n'interagissent entre eux que lorsqu'ils se situent sur le même atome.

On peut donc voir le modèle d'Hubbard comme une extension du modèle de liaison forte. Ce dernier est par ailleurs présent dans le premier terme de droite dans l'équation 2.18. Dans ce modèle, les électrons sont libres de "sauter" d'un site i à un autre site j du réseau avec une énergie cinétique $-t_{ij}$. A partir de ce modèle, émergent des bandes d'énergie où certaines valeurs d'énergies sont inaccessibles aux électrons. On parvient alors à diviser les solides selon le remplissage des bandes au niveau de l'énergie de Fermi : isolant, conducteur, semi-conducteur, etc.

L'ajout du terme d'Hubbard remet les atomes du solide au centre du problème de la physique des électrons. Ainsi, la classification faite sur les solides à l'aide des bandes électroniques peut se retrouver modifiée. A défaut de pouvoir le résoudre, Hubbard avait notamment amélioré les approximations sur son modèle éponyme [55] et a rendu compte de l'existence d'une phase d'isolant de Mott lorsqu'un solide est à demi-rempli, c'est-à-dire lorsqu'il y a exactement un électron par site d'atome. Ce résultat est extrêmement important pour la physique des électrons corrélés puisque le modèle des liaisons fortes d'un réseau carré (ou triangulaire, la géométrie n'a pas d'importance) prédit que le solide sera un conducteur à cette densité.

Mais qu'est-ce qu'une phase d'isolant de Mott ? Sa définition est assez simple à comprendre. Le coût en énergie que doivent payer deux électrons lorsqu'ils sont localisés sur le même site est l'énergie potentielle U . Lorsque U a une valeur suffisamment élevée, la configuration la plus favorable d'un point de vue énergétique est celle où chaque électron est localisé sur un site et où il n'y a plus que des sauts virtuels d'électrons possibles, sinon il faut payer le coût de l'énergie potentielle. Une illustration assez fidèle de l'isolant de Mott est celui de l'embouteillage de voitures où la congestion est telle que plus aucune voiture ne peut avancer, le coût de passer au dessus d'autres voitures avec sa voiture étant un prix trop cher à payer par les conducteurs.

On peut se faire une idée de la densité d'états d'un isolant de Mott en résolvant le cas où le terme cinétique, c'est-à-dire la première somme dans l'équation 2.18, est absent. Dans cette limite appelée la limite des fortes corrélations, le système est diagonal dans l'espace réel et il est possible d'obtenir la fonction de Green de ce modèle à l'aide des équations du mouvement [48]. A demi-remplissage, cette dernière s'écrit :

$$G_{\sigma}(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\omega + i\eta - \frac{U}{2}} + \frac{1}{\omega + i\eta + \frac{U}{2}} \right). \quad (2.19)$$

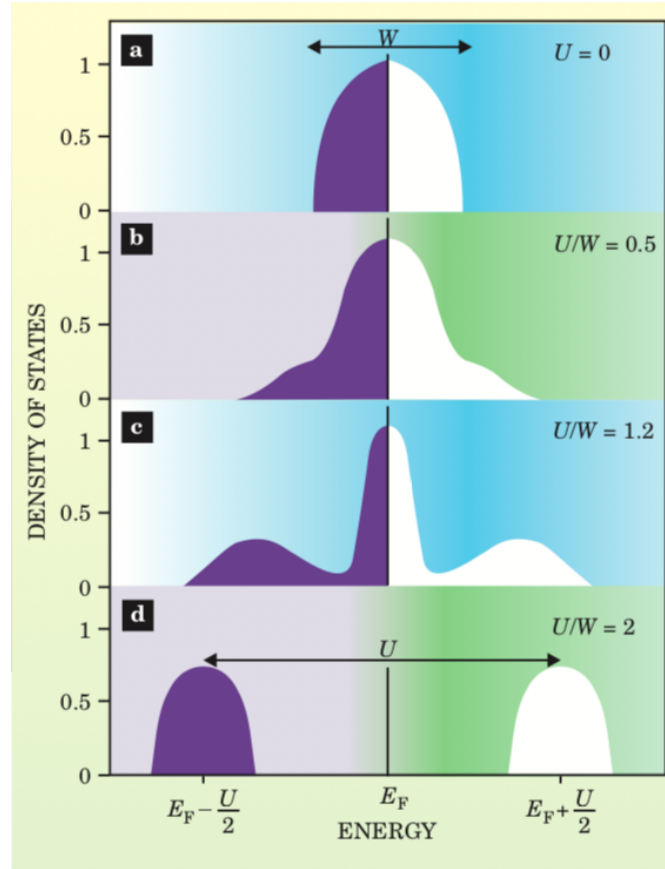


FIGURE 2.1 Densité d'états locale pour différents régimes de l'interaction d'Hubbard normalisée par rapport à la largeur de bande sans interaction W à température nulle. a) Densité d'états en l'absence d'interaction. b) Dans le régime des faibles interactions, on remarque que du poids spectral est transféré à la périphérie de la densité d'états. c) Dans le régime des fortes corrélations, caractérisé par une valeur de U comparable à celle de W , une structure en trois parties se dessine : les deux bandes d'Hubbard situées autour de $\pm U/2$ et un pic de quasi-particules au niveau de Fermi. d) Dans la phase de Mott, on retrouve seulement les bandes d'Hubbard. Un gap électronique d'une largeur comparable au terme d'Hubbard marque le caractère isolant de la phase. Figure tirée de [56].

La densité d'états se compose donc de deux pics situés à $\omega = \pm U/2$ et il existe un gap électronique de largeur U . Lorsque l'on rajoute la partie cinétique mais que l'on reste dans la limite des fortes corrélations caractérisée par $t \ll U$, ces deux pics connaîtront un élargissement, mais la forme globale de la densité d'états n'est pas foncièrement changée. Une phase d'isolant de Mott gardera ces propriétés générales issues de la physique des fortes corrélations : deux bandes d'énergies situées autour de $\omega = -U/2$ et $\omega = U/2$ et que l'on appelle, respectivement, bande inférieure et supérieure d'Hubbard, ainsi qu'un gap de charge au niveau de l'énergie de Fermi.

Entre le cas sans interaction et la phase de Mott, la densité d'états du système change continuellement de forme comme illustré dans la figure 2.1. Le transfert de poids spectral entre les excitations cohérentes de particules, appelé aussi pic de quasi-particules, et les bandes d'Hubbard augmente progressivement avec U . Lorsque U atteint une valeur critique qui est souvent du même ordre de grandeur que la largeur de bande, une transition du premier ordre entre la phase métallique et la phase d'isolant de Mott a lieu qu'on appelle la transition de Mott.

La forme de l'interaction électron-électron est sûrement l'une des plus simples possibles. Malgré cette extraordinaire simplicité, le modèle d'Hubbard capture une physique extrêmement riche avec une multitude de phases avec brisure de symétrie ou de phase exotique comme les liquides de spins. Pourtant, il est tout aussi extraordinairement difficile à résoudre. A ce jour, seulement deux solutions analytiques sont connues : à une dimension [57] et à dimension infinie [45]. Pour des dimensions se situant entre ces deux extrêmes, l'utilisation de méthodes numériques comme la théorie du champ moyen dynamique est impérative.

2.3 Les équations de la théorie du champ moyen dynamique

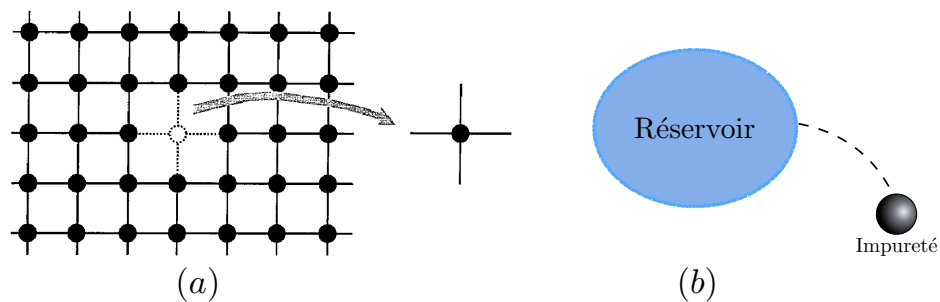


FIGURE 2.2 a) Schéma illustrant la méthode de cavité. Est représenté sur cette image le réseau avec la cavité ainsi que le site de la cavité. La flèche représente le lien qui subsiste entre les deux. Image tirée de [44]. b) Schéma du problème d'impureté quantique. Le site de l'impureté est couplé à un réservoir d'électrons libres.

Dans cette section, nous allons dériver les équations de la DMFT à l'aide de la méthode de la cavité. Pour ce faire, nous nous baserons tout au long de cette dérivation sur l'Hamiltonien général défini dans l'équation 2.18.

De plus, nous allons faire deux hypothèses sur le système 2.18 : nous allons d'abord considérer un système invariant par translation et supposer que la self-énergie du problème

est purement locale¹. La localité de la self-énergie peut paraître une hypothèse extrêmement drastique et arbitraire, mais elle est justifiée par la limite contrôlée de la DMFT puisque en dimension infinie, la self-énergie est locale [45]. Il s'agit donc d'une bonne approximation pour les matériaux de dimension trois et / ou les matériaux avec un grand nombre de coordination. Nous discuterons de l'implication de la localité de la self-énergie à la fin de cette section.

À partir du modèle de Hubbard 2.18, on peut définir la fonction de partition en fonction de variables de Grassmann :

$$Z = \int \prod_i Dc_{i\sigma}^+ Dc_{i\sigma} e^{-S}, \quad (2.20)$$

où nous avons défini l'action de notre système S comme :

$$S = \int_0^\beta d\tau \left(\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^+(\tau) (\partial_\tau - \mu) c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + U \sum_i n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right). \quad (2.21)$$

S'il n'y a pas de doute possible, nous arrêterons de spécifier la dépendance en temps imaginaire τ des variables de Grassmann. La méthode de la cavité repose sur un grand principe : diviser l'ensemble du réseau en deux parties composées d'un site isolé appelé site de la cavité (dont l'index est o) et du réseau en présence de la cavité 2.2(a). En suivant ce principe, l'action se divise en trois parties : l'action du site de la cavité S_o , l'action du réseau en présence de la cavité $S^{(o)}$ et l'action faisant le lien entre le site de la cavité et le reste du réseau ΔS (voir Figure 2.2(a)).

$$S_o = \int_0^\beta d\tau \sum_\sigma c_{o\sigma}^+ (\partial_\tau - \mu) c_{o\sigma} - U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow}, \quad (2.22)$$

$$S^{(o)} = \int_0^\beta d\tau \sum_{i \neq o, \sigma} c_{i\sigma}^+ (\partial_\tau - \mu) c_{i\sigma} - \sum_{i,j \neq o, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - \sum_{i \neq o} U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.23)$$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i \neq o, \sigma} t_{io} c_{i\sigma}^+ c_{o\sigma} + t_{oi} c_{o\sigma}^+ c_{i\sigma} = \int_0^\beta \Delta S(\tau). \quad (2.24)$$

Sans aucune approximation, la fonction de partition s'écrit alors :

$$Z = \int \prod_\sigma Dc_{o\sigma}^+ Dc_{o\sigma} e^{-S_o} \int \prod_{i \neq o, \sigma} Dc_{i\sigma}^+ Dc_{i\sigma} e^{-S^{(o)}} e^{-\Delta S(\tau)}. \quad (2.25)$$

1. Notez que la combinaison d'une self-énergie locale et de l'invariance par translation du système entraîne de facto une self-énergie qui est la même pour chacun des sites du réseau.

Concentrons-nous sur la seconde intégrale du terme de droite en développant l'exponentielle :

$$e^{-\int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)} = 1 - \int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau) + \frac{1}{2} \iint_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) + \dots \quad (2.26)$$

On peut réécrire alors la fonction de partition comme suit :

$$Z = \int \prod_{\sigma} Dc_{o\sigma}^+ Dc_{o\sigma} e^{-S_o} Z^{(o)} \left(1 - \int_0^\beta d\tau \langle \Delta S(\tau) \rangle^{(o)} + \frac{1}{2} \iint_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) \rangle^{(o)} + \dots \right), \quad (2.27)$$

où les symboles $\langle \dots \rangle^{(o)}$ et $Z^{(o)}$ représentent respectivement la moyenne thermodynamique sur le réseau avec la cavité et la fonction de partition correspondante. Il peut être montré que la plupart des moyennes présentes dans l'équation 2.27 décroissent en puissance de $1/d$ [44] où d est la dimension du système. Le seul terme restant lorsque l'on prend la limite des dimensions infinies est le terme en $\langle \Delta S \Delta S \rangle^{(o)}$. En ayant en tête la formule suivante :

$$\begin{aligned} \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) = - \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} & (t_{io} t_{jo} c_{i\sigma}^+(\tau_1) c_{o\sigma}(\tau_1) c_{j\sigma'}^+(\tau_2) c_{o\sigma'}(\tau_2) \\ & + t_{io} t_{oj} c_{i\sigma}^+(\tau_1) c_{o\sigma}(\tau_1) c_{o\sigma'}^+(\tau_2) c_{j\sigma'}(\tau_2) \\ & + t_{jo} t_{oi} c_{o\sigma}^+(\tau_1) c_{i\sigma}(\tau_1) c_{j\sigma'}^+(\tau_2) c_{o\sigma'}(\tau_2) \\ & + t_{oi} t_{oj} c_{o\sigma}^+(\tau_1) c_{i\sigma}(\tau_1) c_{o\sigma'}^+(\tau_2) c_{j\sigma'}(\tau_2)). \end{aligned} \quad (2.28)$$

et s'il n'y a pas de phases particulières dans le système (typiquement, s'il n'y a pas de supraconductivité où des termes en $c^+ c^+$ sont autorisés), le premier et le dernier terme sont nuls lorsque l'on prend la moyenne quantique et thermique sur l'Hamiltonien avec la cavité. En «reconstruisant» l'exponentielle, on se retrouve avec une action effective de la forme suivante :

$$S_{eff} = S_o + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\sigma} c_{o\sigma}^+ \left[\sum_{i,j} t_{io} t_{oj} G_{ji}^{(o)}(\tau_2 - \tau_1) + t_{oi} t_{jo} G_{ij}^{(o)}(\tau_2 - \tau_1) \right] c_{o\sigma}. \quad (2.29)$$

On a défini les fonctions de Green $G_{ij}^{(o)}(\tau_2 - \tau_1) = \langle c_i(\tau_2 - \tau_1) c_j^+(0) \rangle^{(o)}$ et on a abandonné les indices de spin pour des soucis de lisibilité. En réécrivant l'action effective différemment, ces fonctions de Green peuvent être vues comme propageant l'effet du réseau environnant sur le site de la cavité :

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 c_{o\sigma}^+(\tau_1) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau_2 - \tau_1) c_{o\sigma}(\tau_2) + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow} n_{o\downarrow}, \quad (2.30)$$

avec :

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_{i,j \neq o} t_{io} t_{oj} G_{ji}^{(o)}(i\omega_n). \quad (2.31)$$

Pour arriver au résultat précédent, nous avons seulement joué avec les variables muettes des sommes.

L'objet 2.31 est nommé le *champ de Weiss* du système. Ce champ apparaît comme un lien entre le système du réseau interagissant et le problème d'une impureté couplée avec un bain non interagissant (le modèle d'Anderson [58]) puisque dans ces deux cas, le champ de Weiss a une forme similaire. Comme dans les champs moyens statiques que l'on rencontre souvent en physique (le cas du modèle d'Ising en tête), le champ de Weiss va être utilisé comme outil de convergence vers la solution. Cependant, pour parfaire notre dérivation d'un champ moyen, il faut dériver une relation d'auto-cohérence. On peut commencer par réécrire le champ de Weiss en fonction des fonctions de Green du réseau entier en utilisant la relation : $G_{ij}^{(o)} = G_{ij} - G_{io}G_{oj}/G_{oo}$ [44]. Physiquement, cette équation peut s'interpréter comme suit : la fonction de Green du réseau en présence de la cavité est la même que la fonction de Green sans la cavité à laquelle on soustrait les *chemins* passant par la cavité. Il faut souligner que cette relation est exacte en dimension infinie seulement. De plus, comme cette formule gère directement le cas $G_{oo}^{(o)} = 0$, nous n'avons plus besoin de restreindre la somme aux sites différents de o :

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_{i,j} t_{io} t_{oj} \left(G_{ji} - \frac{G_{jo}G_{oi}}{G_{oo}} \right). \quad (2.32)$$

Avant de continuer, faisons une digression qui facilitera la dernière étape de notre calcul. Nous pouvons réécrire l'équation 2.10 sous forme matricielle. Cela nous donne :

$$z\mathbf{IG} = \mathbf{I} - \mathbf{tG} \quad (2.33)$$

$$\mathbf{G} = (z\mathbf{I} + \mathbf{t})^{-1}, \quad (2.34)$$

où on définit $z = i\omega_n + \mu$. Un peu d'algèbre nous permet de définir une équation du mouvement alternative qui consiste seulement en la contraposée de l'équation de 2.10 :

$$z\mathbf{G} = \mathbf{I} - \mathbf{Gt}, \quad (2.35)$$

ou encore :

$$zG_{ij}(z) = \delta_{ij} - \sum_l G_{il} t_{lj}. \quad (2.36)$$

De plus, l'équation de Dyson vue en 2.16 s'écrit dans le cas d'une self-énergie locale Σ

comme suit :

$$G_{ij}(i\omega_n) = G_{ij}^0(i\omega_n) + \sum_{l,m} G_{il}^0(i\omega_n) \Sigma(i\omega_n) \delta_{lm} G_{mj}(i\omega_n) \quad (2.37)$$

$$= G_{ij}^0(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n) \sum_l G_{il}^0(i\omega_n) G_{lj}(i\omega_n). \quad (2.38)$$

$$(2.39)$$

En remarquant que la dernière somme n'est autre que le produit de deux matrices, on se permet de réécrire l'équation ci-dessus avec des matrices :

$$\mathbf{G}(i\omega_n) = \mathbf{G}^0(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n) \mathbf{I} \mathbf{G}^0(i\omega_n) \mathbf{G}(i\omega_n), \quad (2.40)$$

où \mathbf{I} est la matrice identité. Ainsi, il est simple de montrer que :

$$\mathbf{G} = [(\mathbf{G}^0)^{-1} - \Sigma \mathbf{I}]^{-1}. \quad (2.41)$$

Combinée avec l'équation du mouvement 2.10, on peut écrire : $G_{ij}(z) = G_{ij}^0(\tilde{z})$ avec $\tilde{z} = i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)$. Cette relation nous permet de définir une équation du mouvement généralisée pour les fonctions de Green interagissantes :

$$\tilde{z} G_{ij} = \delta_{ij} - \sum_l t_{il} G_{lj}. \quad (2.42)$$

Avec l'aide de ces relations, on peut s'attaquer à la simplification de la formule de l'équation de Weiss 2.32. Le premier terme dans la somme peut se simplifier de la façon suivante :

$$\sum_{i,j} t_{io} t_{oj} G_{ji} = \sum_i t_{io} \sum_j t_{oj} G_{ji} \quad (2.43)$$

$$= \sum_i t_{io} (\delta_{oi} - \tilde{z} G_{oi}) \quad (2.44)$$

$$= -\tilde{z} \sum_i t_{io} G_{oi} \quad (2.45)$$

alors que pour le second terme, on a :

$$\sum_{i,j} t_{io} t_{oj} \frac{G_{jo} G_{oi}}{G_{oo}} = \sum_i \frac{t_{io} G_{oi}}{G_{oo}} \sum_j t_{oj} G_{jo} \quad (2.46)$$

$$= \sum_i \frac{t_{io} G_{oi}}{G_{oo}} (1 - \tilde{z} G_{oo}) \quad (2.47)$$

$$= -\tilde{z} \sum_i t_{io} G_{oi} + G_{oo}^{-1} \sum_i t_{io} G_{oi} \quad (2.48)$$

$$= G_{oo}^{-1} + \tilde{z} - \tilde{z} \sum_i G_{oi} t_{io}. \quad (2.49)$$

En utilisant l'équation du mouvement alternative définie équation 2.36 :

$$\tilde{z} G_{oo} = 1 - \sum_i t_{oi} G_{io} = 1 - \sum_i G_{oi} t_{io} \quad (2.50)$$

et un peu d'algèbre, l'équation 2.32 devient :

$$\mathcal{G}_0^{-1} = \Sigma(i\omega_n) + G_{oo}^{-1}(i\omega_n). \quad (2.51)$$

Arrêtons-nous quelques minutes après ce long, mais nécessaire passage mathématique. La dérivation des équations du champ moyen dynamique ne repose sur aucune approximation en dimension infinie. Utiliser la DMFT ou résoudre le modèle directement donnera donc le même résultat lorsque $d \rightarrow \infty$ et la principale approximation que l'on pourrait reprocher à cette théorie est de l'utiliser sur des systèmes de dimension inférieure à l'infini. De plus, nous sommes passés assez rapidement dans le paragraphe précédent sur le lien entre le réseau interagissant et le modèle d'Anderson. Les actions effectives sont certes similaires, mais ce choix reste arbitraire et d'autres modèles d'impuretés comme le modèle de Wolff [59] pourraient être utilisés. Ce choix ne change que la forme du champ de Weiss sans toucher à la physique du problème.

Le paradigme de la théorie du champ moyen dynamique est de remettre l'atome au centre de la physique de la matière condensée. En effet, pour traiter les interactions dans un solide, deux approches peuvent être utilisées : la première consiste à considérer le cas d'électrons libres dans un réseau périodique et de regarder ce qui se passe lorsque l'on rajoute les interactions. La seconde, plus proche d'une approche à la chimiste, consiste à traiter correctement un atome isolé, qui est déjà un petit problème à N-corps en soi, puis de considérer les recouvrements d'orbitales. *In fine*, ces deux approches sont équivalentes dans le sens où

elles devraient donner la même solution physique. La théorie du champ moyen dynamique en se concentrant sur l'atome dans un solide emprunte la seconde approche pour traiter le problème d'un réseau sous interactions.

2.4 Le modèle d'Anderson et la théorie du champ moyen dynamique

Le modèle de l'impureté quantique d'Anderson, que l'on appellera modèle d'Anderson pour plus de facilité, modélise une impureté quantique sur laquelle les électrons peuvent interagir, mais peuvent aussi la quitter pour se rendre dans un réservoir d'électrons non interagissants. L'Hamiltonien de ce système s'écrit généralement comme suit :

$$\hat{H}_{\text{And}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{loc}} + \hat{H}_{\text{hyb}} + \hat{H}_{\text{Int}} \quad (2.52)$$

où \hat{H}_0 est l'Hamiltonien des électrons libres dans le bain. On note $\epsilon_{\mathbf{k}}$, l'énergie de dispersion, μ le potentiel chimique des électrons du bain et $\hat{c}^{(\dagger)}$ les opérateurs de destruction (création) des électrons du bain :

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.53)$$

\hat{H}_{loc} est l'Hamiltonien *local* de l'impureté. Ici, l'impureté aura une énergie de site ϵ_f et les opérateurs de destruction (création) sur l'impureté seront notés $\hat{d}^{(\dagger)}$:

$$\hat{H}_{\text{loc}} = \epsilon_f \sum_{\sigma} \hat{d}_{\sigma}^\dagger \hat{d}_{\sigma}. \quad (2.54)$$

Le terme \hat{H}_{hyb} décrit le couplage entre l'impureté et le réservoir d'électrons. Mathématiquement, ce couplage est décrit par le terme complexe $V_{\mathbf{k}}$:

$$\hat{H}_{\text{hyb}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(V_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{d}_{\sigma} + c.h \right). \quad (2.55)$$

Enfin, le dernier terme de l'expression 2.52 est le terme d'interaction d'Hubbard entre les électrons de l'impureté seulement :

$$\hat{H}_{\text{Int}} = U \hat{d}_{\uparrow}^\dagger \hat{d}_{\uparrow} \hat{d}_{\downarrow}^\dagger \hat{d}_{\downarrow}. \quad (2.56)$$

L'Hamiltonien 2.52 n'a pas de solution exacte connue lorsque l'Hamiltonien \hat{H}_{Int} est présent. Dans le cas contraire, la fonction de Green de l'impureté ne pose pas particulièrement de

problèmes à être dérivée (cf. Annexe A.1 pour une dérivation simple utilisant les diagrammes de Feynman) et a la forme suivante :

$$G_d^0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_f - \Delta(i\omega_n)}, \quad (2.57)$$

où $\Delta(i\omega_n)$ est appelée la fonction d'hybridation :

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.58)$$

La fonction Δ peut être vue comme une somme de fonctions de Green d'électrons libres pondérées par un poids $|V_{\mathbf{k}}|^2$. Elle ressemble aussi au dernier terme de l'équation 2.31. Physiquement, elle modélise la possibilité qu'ont les électrons de passer du réservoir à l'impureté et inversement. En présence du terme H_{int} , la fonction de Green de l'impureté interagissante s'écrit à l'aide de la self-énergie de l'impureté Σ_{imp} :

$$G_d(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_f - \Sigma_{imp}(i\omega_n) - \Delta(i\omega_n)}. \quad (2.59)$$

Il faut aussi remarquer que l'expression de la fonction d'hybridation Δ n'est pas affectée par la prise en compte de l'Hamiltonien H_{Int} . Cela est dû au fait que le terme d'Hubbard ne concerne que les électrons sur l'impureté.

2.4.1 La boucle de la théorie du champ moyen dynamique

Si l'on est capable de résoudre le modèle d'Anderson d'une quelconque manière, la mise en place de la DMFT se fait alors en suivant les étapes présentées ci-dessous. Pour l'itération p :

1. Résoudre le modèle d'Anderson à partir d'une fonction d'hybridation Δ_p et obtenir la self-énergie de l'impureté $\Sigma_{imp,p}$.
2. Approximer la self-énergie du réseau par celle de l'impureté : $\Sigma_p(i\omega_n, \mathbf{k}) \approx \Sigma_{imp,p}(i\omega_n)$.
3. Mettre à jour la fonction d'hybridation Δ_{p+1} du modèle d'Anderson à l'aide de la relation d'autocohérence 2.51 :

$$\Delta_{p+1}(i\omega_n) = i\omega_n - \epsilon_f - \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_p(i\omega_n)} \right)^{-1} - \Sigma_p(i\omega_n). \quad (2.60)$$

4. Si le système n'a pas encore convergé, retourner à l'étape 1.

Une fois la boucle de DMFT terminée, la fonction de Green du réseau est simplement donnée par la formule suivante :

$$G(i\omega_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)}. \quad (2.61)$$

Le cas de la première itération $p = 0$ revient à définir une fonction d'hybridation Δ_0 adéquate avec laquelle on commencera la boucle de la DMFT. Plusieurs choix sont possibles dépendamment du solveur d'impureté utilisé. On peut par exemple utiliser une fonction d'hybridation obtenu pour un jeu de paramètres différent (température, densité électronique, etc), partir d'une fonction d'hybridation aléatoire ou bien utiliser la valeur asymptotique de la fonction d'hybridation (cf. 2.5.2).

La principale difficulté dans la mise en place de la DMFT est donc la résolution du modèle d'impureté d'Anderson. Historiquement, les plus anciens solutionneurs d'impuretés sont l'algorithme de Hirsch-Fye en Monte-Carlo quantique [60] et la diagonalisation exacte [61]. Depuis, une multitude d'autres solutionneurs ont vu le jour, avec leurs avantages et leurs inconvénients. Parmi les plus connus, citons les méthodes basées sur le Monte-Carlo quantique (à temps continu [62], variationnel [63, 64], etc.) ou encore la théorie de la perturbation itérée [65, 66] (IPT, *Iterated Perturbation theory*). Attardons-nous quelque peu sur cette IPT puisque nous rencontrerons ce solutionneur d'impureté dans le chapitre 5.

2.5 La théorie de la perturbation itérée

Historiquement, le solutionneur d'impureté IPT est l'un des premiers à avoir été utilisés en DMFT. Bien que l'on retrouve le mot perturbation dans son nom, il permet de capturer qualitativement des transitions de phase telle que la transition métal-isolant de Mott.

2.5.1 La théorie de la perturbation itérée

Comme son nom l'indique, la théorie de la perturbation itérée se base sur un développement perturbatif à l'ordre deux de la self-énergie de l'impureté Σ . Ainsi, cette dernière s'écrit dans le paradigme de l'IPT :

$$\Sigma_{\sigma}(i\omega_n) = U n_{\bar{\sigma}} + \tilde{\Sigma}_{\sigma}^{(2)}(i\omega_n), \quad (2.62)$$

avec $\bar{\sigma}$ le spin opposé de σ . Le premier terme de droite correspond au célèbre terme Hartree-Fock, c'est-à-dire l'ordre un en U dans le développement perturbatif de la self-énergie alors que le terme $\tilde{\Sigma}^{(2)}$ correspond au terme du second ordre. l'expression de ce dernier en temps imaginaire prend la forme simple suivante (cf. Annexe A.2) :

$$\tilde{\Sigma}_{\sigma}^{(2)}(i\omega_n) = -U^2 \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{\sigma}^0(\tau) G_{\bar{\sigma}}^0(-\tau) G_{\bar{\sigma}}^0(\tau), \quad (2.63)$$

avec la fonction de Green de l'impureté :

$$G_{\sigma}^0 = \frac{1}{i\omega_n + \tilde{\mu}_{\sigma} - \Delta(i\omega)}. \quad (2.64)$$

Le terme similaire à un potentiel chimique $\tilde{\mu}_{\sigma}$ est égal à $-\epsilon_f - U n_{\bar{\sigma}}$. Dans la suite de cette section, nous ne considérerons que le cas paramagnétique où $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n/2$ et on notera $\tilde{\mu}_{\sigma}$ comme $\tilde{\mu}_0$. Malgré son apparente simplicité de prime abord, ce solutionneur d'impureté présente un certain nombre de qualités indéniables : a demi-remplissage, il est exact dans les limites où $U = 0$ (modèle sans interaction) et où $t_{ij} = 0$ (limite atomique, t_{ij} étant les amplitudes de saut des électrons sur le réseau).

Dans le but de généraliser le solutionneur d'impureté loin du demi remplissage, on préférera à l'équation 2.62 l'ansatz suivant :

$$\Sigma_{\sigma}(i\omega_n) = U n_{\bar{\sigma}} + \frac{A \tilde{\Sigma}_{\sigma}^{(2)}(i\omega_n)}{1 - B \tilde{\Sigma}_{\sigma}^{(2)}(i\omega_n)}, \quad (2.65)$$

avec

$$A = \frac{n(2-n)}{n_0(2-n_0)} \quad (2.66)$$

$$B = \frac{(1 - \frac{n}{2})U + \tilde{\mu}_0 - \mu}{\frac{n_0}{2} (1 - \frac{n_0}{2} U^2)}. \quad (2.67)$$

Avec les définitions : $n_0 = 2T \sum_{\omega_n} G^0(i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^-}$ et $n = 2T \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} G(i\omega_n, \mathbf{k}) e^{-i\omega_n 0^-}$, la densité électronique du réseau.

Introduit par Kajueter *et al.* [65], cet ansatz a été dérivé dans le but de retrouver certaines limites de la self-énergie du réseau lorsque le réseau n'est pas à demi-rempli. En effet, le paramètre A permet de retrouver le comportement hautes fréquences de la self-énergie du réseau et le paramètre B permet de retrouver la self-énergie dans la limite atomique. Alors que la densité électronique du réseau est un paramètre physique que l'on ne peut pas faire varier pour faire converger la boucle DMFT, il existe une certaine liberté dans

la détermination de n_0 (et par extension de $\tilde{\mu}_0$). Alors que Kajueter *et al.* proposent de le déterminer en imposant la règle de somme de Friedel, on impose souvent n_0 égal à n [67] qu'Arsenault *et al.* nomment IPT- n_0 [66]. Cette méthode présente quelques inconvénients notamment dans le régime des fortes interactions loin du demi-remplissage. Comme nous ne nous trouverons jamais dans ce régime d'interaction dans ce travail de thèse, l'IPT- n_0 peut être utilisé avec confiance.

2.5.2 Comportement asymptotique de la fonction d'hybridation

On pourrait se poser la question de l'initialisation de la boucle DMFT avec l'IPT comme solutionneur d'impureté. Quelle valeur de départ donner à la fonction d'hybridation? Une réponse possible est d'utiliser le comportement asymptotique de cette dernière. En effet, lorsque ω_n est assez grand, on peut écrire [68, 69] :

$$\Delta_{\text{asym}}(i\omega_n) \approx \frac{\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^2 - (\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}})^2}{i\omega_n}. \quad (2.68)$$

Pour donner une preuve suffisamment générale, exprimons la fonction de Green locale G_{ll} en utilisant l'invariance par translation :

$$G_{ll}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N G_{ll} = \frac{1}{N} \text{Tr} [\mathbf{G}(i\omega_n)] \quad (2.69)$$

$$= \frac{1}{N} \text{Tr} [(i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)) \mathbf{I} - \mathbf{H}^0]^{-1}, \quad (2.70)$$

La matrice \mathbf{H}_0 est l'Hamiltonien libre \hat{H}_0 dans une représentation matricielle. Un développement de Taylor de la fonction de Green 2.70 à l'ordre deux nous donne :

$$G_{ll} \approx \frac{1}{i\omega_n} \left[\frac{1}{N} \text{Tr} [\mathbf{I}] - \frac{1}{N} \frac{\text{Tr}[\mathbf{X}]}{i\omega_n} + \frac{1}{N} \frac{\text{Tr}[\mathbf{X}\mathbf{X}]}{i\omega_n^2} \right], \quad (2.71)$$

où \mathbf{X} est la matrice cumulant : $\mathbf{X} = (\mu - \Sigma(i\omega_n))\mathbf{I} - \mathbf{H}_0$. On peut réutiliser cette formule dans la relation d'auto-cohérence de la DMFT, présentée équation 2.60. Après inversion de la formule 2.70, un développement limité valable dans la limite asymptotique et un peu d'algèbre, on obtient :

$$\Delta_{\text{asym}}(i\omega_n) = \frac{\frac{1}{N} \text{Tr} [\mathbf{H}^0 \mathbf{H}^0] - \left(\frac{1}{N} \text{Tr} [\mathbf{H}^0] \right)^2}{i\omega_n}. \quad (2.72)$$

La trace d'une matrice étant indépendante de la base choisie pour représenter la matrice Hamiltonien \mathbf{H}_0 , on retrouve l'expression 2.68 lorsque l'on choisit la base des moments \mathbf{k} . Il est intéressant de remarquer que l'on a utilisé aucune hypothèse sur le comportement asymptotique de la self-énergie du réseau. Nous verrons dans le chapitre 5 sur la DMFT sous champ magnétique que le comportement asymptotique de la fonction d'Hybridation n'est pas affecté par l'effet orbital induit par un champ magnétique externe.

2.6 La diagonalisation exacte

Les solutionneurs d'impureté basés sur la diagonalisation exacte font partie des solutionneurs les plus robustes et les plus précis lorsque l'on souhaite étudier un problème à très basse température voire à température nulle. Dans la suite de ce travail de thèse, nous référerons à ces types de solutionneurs par la contraction : **diagonalisation exacte**.

La diagonalisation exacte repose sur une représentation matricielle du problème d'impureté [61]. Comme la principale limitation de cette approche est la taille exponentiellement grande de la matrice représentant l'Hamiltonien lorsque l'on souhaite prendre en compte un continuum d'états pour le bain, on approxime ce dernier par un nombre fini d'états. De façon pratique, cela correspond à considérer une impureté couplée à une dizaine de *sites* de bain. Le mot *site* est mis en italique car il s'agit d'un abus de langage. En effet, les états du bain n'ont pas de position physique et ne peuvent pas vraiment être considérés comme des sites réels. L'Hamiltonien correspondant à une impureté couplée à n_b sites de bain s'écrit donc :

$$\hat{H}^{\text{ED}} = \epsilon_d \sum_{\sigma} \hat{d}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\sigma} + \sum_{\sigma, l=1}^{n_b} \epsilon_l \hat{c}_{\sigma l}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma l} + U \hat{d}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{d}_{\uparrow} \hat{d}_{\downarrow}^{\dagger} \hat{d}_{\downarrow} + \sum_{\sigma, l=1}^{n_b} \left(V_l \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\sigma} + \text{c.h} \right). \quad (2.73)$$

Malgré le nombre relativement faible d'états de bain, la matrice correspondant à l'Hamiltonien 2.73 s'échelonne comme une fonction exponentielle du nombre de sites de bain. Plus exactement, la taille de la matrice est de 4^{n_b+1} lorsque l'on choisit la base de Fock [70].

Cette troncation sur le nombre d'états du bain a une conséquence non négligeable sur la relation d'auto-cohérence de la DMFT puisque cette dernière ne peut plus être satisfaite exactement. Pour parer à ce problème, l'équation d'auto-cohérence 2.60 est remplacée par un problème d'optimisation où l'on cherche à minimiser la fonction de distance

$$\chi^2 = \frac{1}{n_{\text{max}} + 1} \sum_{n=0}^{n_{\text{max}}} |G^{-1\text{And}}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n)|^2, \quad (2.74)$$

où n_{\max} est le nombre de fréquences de Matsubara pris en compte dans la minimisation du problème, G est la fonction de Green du réseau local et G^{And} est la fonction de Green de l'impureté interagissante :

$$G^{\text{And}}(i\omega_n) = \left(i\omega_n - \epsilon_d - \Sigma(i\omega_n) - \sum_{l=1}^{n_b} \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \epsilon_l} \right)^{-1}. \quad (2.75)$$

Ainsi, le problème d'optimisation a pour but de minimiser la différence entre la fonction de Green locale et la fonction de Green de l'impureté sur une certaine plage de fréquence de Matsubara en jouant sur les paramètres variationnels V_l et ϵ_l .

Enfin, pour résoudre le problème d'impureté, deux méthodes existent : la méthode de Lanczos et la diagonalisation totale. La première permet d'obtenir l'état fondamental du problème et elle est donc préconisée à température nulle. Elle présente l'avantage d'être beaucoup plus rapide que la diagonalisation totale de la matrice et permet donc d'obtenir de meilleurs résultats dans le sens où on peut rajouter un grand nombre de site de bains (typiquement dix sites de bain et le site de l'impureté), ce qui affine quantitativement les résultats.

La diagonalisation totale de la matrice est contrainte par les limitations usuelles des librairies informatiques d'algèbre linéaire. La matrice ne devant pas être trop grande, un nombre restreints de site de bain est à préconiser (généralement cinq ou six). Cependant, l'accès à l'ensemble des énergies du système ouvre la voie aux températures finies.

La diagonalisation exacte est donc une méthode à la fois robuste et efficace pour résoudre le problème d'impureté en DMFT. Malgré une approximation importante sur le modèle d'impureté d'Anderson, ses résultats sont satisfaisants lorsqu'on les compare avec les résultats de méthodes plus sophistiquées comme les méthodes Monte-Carlo quantiques. De plus, la diagonalisation exacte est plus rapide et nettement moins coûteuse en puissance numérique que ses homologues stochastiques.

2.7 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons commencé par énumérer rapidement les outils mathématiques qui vont nous suivre tout au long de ce travail de thèse. Les concepts tels que la fonction de Green, la self-énergie ou encore les fréquences de Matsubara ont une importance particulière dans les solutions des problèmes à N-corps.

L'ensemble de ces outils permet d'appréhender la physique particulière du modèle d'Hubbard. Ce modèle repose sur une interaction électron-électron purement locale, mimant ainsi l'écrantage qui a lieu dans un solide. Malgré sa surprenante simplicité, la physique qui en découle est extrêmement riche. Outre l'existence de phases magnétiques et de supraconductivité non conventionnelle dans son diagramme des phases, le modèle d'Hubbard est surtout connu pour rendre compte de la transition métal-isolant de Mott à demi-remplissage. Dans cet isolant, l'interaction est tellement forte qu'elle empêche toute délocalisation des électrons qui se retrouvent chacun localisé sur un site du réseau. Malheureusement, l'utilisation de solution analytique est quasiment impossible pour ce modèle rendant nécessaire l'utilisation de méthodes numérique comme la DMFT.

Nous avons dérivé les équations de la DMFT dans le cas simple d'un système à une bande et invariant par translation. Cette dérivation nous a permis d'introduire la *relation d'auto-cohérence* de la DMFT 2.60 et de comprendre précisément ce qu'est la DMFT : une théorie de champ moyen pour les fluctuations spatiales qui prend en compte exactement les fluctuations temporelles. Cette théorie repose sur une «projection» du problème du réseau infini sur le problème d'une impureté quantique interagissante et couplée à un réservoir d'électrons libres.

Nous avons abordé en surface le modèle d'Anderson pour illustrer les équations de la DMFT. Ce modèle peut se comprendre comme suit : il est composé d'une impureté quantique sur laquelle les électrons sont soumis à une interaction de type Hubbard. Cette dernière est «ressentie» par les électrons seulement lorsque deux électrons se trouvent sur l'impureté. Pour rendre compte mathématiquement de ce couplage, une fonction d'hybridation permet de modéliser l'effet qu'a le réservoir sur l'impureté quantique. Sa détermination dans le paradigme de la DMFT se fait de façon auto-cohérente.

La DMFT ne peut pas être utilisée si l'on ne peut résoudre le problème d'impureté. Pour ce faire, un grand nombre de méthodes appelées solveurs d'impureté ont été développées. Dans ce travail de thèse, deux solveurs ont été intensément utilisés : le solveur IPT se base sur un développement perturbatif au second ordre en U de la self-énergie pour résoudre le problème d'impureté. Sa forme semi-analytique permet d'illustrer

parfaitement le lien subtil qui existe entre le problème du réseau et le problème de l'impureté quantique dans la DMFT ainsi que le rôle crucial que joue la fonction d'hybridation. Le comportement asymptotique de cette dernière est une possible approche pour "initialiser" la boucle de DMFT avec ce solveur. Ce comportement asymptotique peut être exprimé en termes de somme de l'énergie de dispersion et ne dépend ni du potentiel chimique, ni de la self-énergie du système.

La diagonalisation exacte est un autre solveur d'impureté basé sur une représentation matricielle du problème d'impureté quantique. La principale approximation repose sur le fait que le réservoir d'électrons auquel est couplée l'impureté n'est composé que d'un nombre restreint d'états. Une conséquence remarquable de cette approximation est que la relation d'auto-cohérence de la DMFT ne peut plus être exactement satisfaite. On lui préférera à la place un problème d'optimisation qui permet d'approcher la relation d'auto-cohérence [2.60](#). La diagonalisation exacte est aujourd'hui une méthode éprouvée qui est largement préférée à l'IPT par la communauté scientifique.

Chapitre 3

Semi-métaux de Weyl et interactions

Introduction

La physique topologique a été hermétique pendant de longues années à la prise en compte des corrélations électroniques dans les matériaux. En effet, les grands concepts de ce domaine reposent essentiellement sur la théorie des bandes électroniques et, bien que des généralisations de leur définition aient été proposées pour prendre en compte les interactions, aucune n'est robuste aux fortes corrélations électroniques. Pourtant, ce serait une erreur d'omettre totalement les interactions dans la physique topologique puisque ces dernières existent et ont un impact dans les matériaux réels.

Dans le cas des semi-métaux de Weyl, plusieurs approches ont été utilisées pour comprendre l'effet des interactions électroniques. Cela va de l'approximation de la phase aléatoire [71] à la théorie du groupe de renormalisation [72] en passant par des méthodes sur amas comme la théorie des perturbations sur amas (CPT pour Cluster Perturbation Theory) où l'approximation variationnelle sur amas (VCA pour Variational Cluster Approximation) [73, 74]. Malgré leur faible nombre, ces études laissent néanmoins entrevoir une riche physique avec la présence de phénomènes exotiques comme un liquide de Fermi marginal lorsque les interactions sont à longue portée ou un lien entre nombre de nœud de Weyl et interaction à courte portée.

Ce chapitre a pour but de dresser une liste non exhaustive des propriétés de semi-métaux de Weyl avec interaction électronique de type d'Hubbard résolue à l'aide de la DMFT et d'un solveur d'impureté basé sur la diagonalisation exacte. La section 3.1 est consacrée aux effets des interactions en général. On y introduit le modèle libre sur réseau dans la

sous-section 3.1.1 et les principales propriétés comme la double occupation ou le poids des quasi-particules sont discutées et comparées à celle obtenues sur réseau cubique dans la sous-section 3.1.2. Dans la sous-section 3.1.3, une discussion sur l’effet des interactions sur la position des nœuds de Weyl nous permet d’approfondir ce phénomène souvent mis en avant dans les études utilisant des méthodes sur amas. Enfin, la section 3.2 compare les résultats de la DMFT avec ceux d’autres méthodes et pose la question de la diffusion inélastique des fermions de Weyl.

Sauf mention contraire, les résultats sont obtenus en utilisant la DMFT avec un solveur d’impureté basé sur la diagonalisation exacte avec cinq sites de bain à $\beta = 80$. 1024 fréquences de Matsubara ont été utilisées pour évaluer la fonction de distance. Pour satisfaire la relation d’auto-cohérence, un seuil de tolérance absolu en dessous duquel la fonction de distance est considérée comme minimisée est fixé à $0.00002t$.

3.1 Effets des interactions sur les semi-métaux de Weyl dans le paradigme de la théorie du champ moyen dynamique

3.1.1 Modèle sans interaction

Avant de parler des effets des interactions sur les semi-métaux de Weyl, il est important de présenter le modèle sans interaction que nous utilisons tout au long de ce travail de thèse. Nous nous baserons sur un modèle sur réseau qui brise la symétrie par renversement du temps. L’Hamiltonien correspondant s’écrit de la façon suivante :

$$\hat{\mathbf{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}}^\dagger \{ 2t \sin(k_x) \boldsymbol{\sigma}_x + 2t \sin(k_y) \boldsymbol{\sigma}_y + [h - 2t (\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z))] \boldsymbol{\sigma}_z \} \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \quad (3.1)$$

avec t , le terme de saut des électrons et h , un terme Zeeman qui permet de *jouer* sur l’aimantation du système et qui sera particulièrement utile dans le chapitre 4. Le terme de saut t est pris comme l’unité d’énergie ($t \equiv 1$) et par conséquent, toutes les grandeurs physiques dont la dimension est celle d’une énergie seront en unité de t . De plus, on choisira le système d’unité de Hartree pour la suite, c’est-à-dire que l’on fixe $\hbar = e = k_B = 1$.

L’Hamiltonien et les vecteurs opérateurs sont dans la base des spins avec les matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma}_i$ et $\mathbf{C}_{\mathbf{k}}^{(\dagger)} = (\hat{c}_{\uparrow}^{(\dagger)}, \hat{c}_{\downarrow}^{(\dagger)})^{(T)}$. Comme ce modèle se résume à une matrice 2×2 , il est

facile d'obtenir les énergies propres du système :

$$\epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\{h - 2t [\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z)]\}^2 + [2t \sin(k_x)]^2 + [2t \sin(k_y)]^2} \quad (3.2)$$

et par la même occasion, les positions des nœuds de Weyl. Ces derniers sont au nombre de quatre lorsque $|h| < 2t$, situés $(0, \pi, \pm \arccos(h/2t))$ et $(\pi, 0, \pm \arccos(h/2t))$ dans la première zone de Brillouin. Lorsque $2t < |h| < 6t$, le nombre de nœud se réduit à deux situés à $(0, 0, \pm \arccos((h-4)/2t))$ ou $(\pi, \pi, \pm \arccos((h+4)/2t))$ si $h < 0$. Enfin, lorsque $|h| > 6t$, le système se retrouve complètement gappé. Ce gap électronique est le signe que notre système se trouve dans une phase d'isolant de bande peuplé par une seule espèce de spin.

Il est intéressant de remarquer que dans le cas sans interaction, la disparition des nœuds de Weyl se fait toujours de la même façon : deux nœuds de chiralité opposée fusionnent avant de pouvoir ouvrir un gap électronique ou changer le nombre de nœuds dans la première zone de Brillouin. Cela fait écho à la robustesse des nœuds de Weyl abordée dans le chapitre 1. Enfin, il est important de souligner que ce trait est commun aux autres modèles sur réseau utilisés pour rendre compte d'interaction de type Hubbard.

Par exemple, le modèle sur réseau utilisé par Witczak-Krempa *et al.* [73] :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} [\{2t (\cos(k_x) - \cos(k_0)) + m (2 - \cos(k_y) - \cos(k_z))\} \boldsymbol{\sigma}_x + 2t \sin(k_y) \boldsymbol{\sigma}_y \\ &+ 2t \sin(k_z) \boldsymbol{\sigma}_z] \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (3.3)$$

et celui utilisé par Laubach *et al.* [74] :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} [\{m_x - 2t \cos(k_x) + m_0 (2 - \cos(k_y) - \cos(k_z))\} \boldsymbol{\sigma}_x + 2t \sin(k_y) \boldsymbol{\sigma}_y \\ &+ 2t \sin(k_z) \boldsymbol{\sigma}_z] \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (3.4)$$

peuvent exhiber un gap électronique lorsque les paramètres hors diagonaux m , m_0 et m_x sont suffisamment grands. Au lieu de jouer sur les fluctuations ferromagnétiques comme dans notre cas, ces modèles reposent sur des fluctuations anti-ferromagnétiques.

3.1.2 Propriétés générales : Double occupation, poids de quasi-particule, etc.

Pour l'ensemble des résultats présentés dans cette sous-section, le terme Zeeman h est fixé à zéro.

Comme nous nous concentrons sur les propriétés liées aux interactions à demi-remplissage,

prenons le temps d'expliciter la symétrie particule-trou de notre modèle. En effet, l'Hamiltonien total avec interaction s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U \sum_i \left(\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (3.5)$$

où \hat{H}_0 est l'Hamiltonien présenté dans l'équation 3.1. Le terme d'interaction est légèrement différent de celui auquel on est habitué (cf. Chapitre 2) mais il présente l'avantage de laisser le potentiel chimique indépendant des interactions à demi-remplissage. En effet, l'Hamiltonien 3.5 est laissé invariant sous la transformation $\hat{c}_{i\sigma} \rightarrow \hat{d}_{i,-\sigma}^\dagger$ (avec $\sigma = \pm 1$ dépendamment du spin) lorsque l'on fixe le potentiel chimique à $\mu = 0$ (voire plus bas). Ce dernier sera donc toujours égal à zéro à demi-remplissage quelle que soit la valeur du terme d'Hubbard U . Ce choix d'interaction n'est pas vraiment pertinent dans ce chapitre mais il sera utile lorsque l'on abordera la question de l'aimantation orbitale dans le chapitre 4.

Enfin, cet Hamiltonien exhibe des symétries qui pourront nous aider à comprendre quelques propriétés physiques. Nous essayerons de nous rapprocher des conventions déjà utilisées dans la physique des hautes énergies. Ainsi, on peut commencer par définir des opérations discrètes : l'opérateur parité P , l'opérateur de renversement du temps T, \mathcal{T}_Q est la translation par un vecteur $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ et enfin les opérations miroir par rapport au plan xz et yz nommées respectivement \mathcal{M}_{xz} et \mathcal{M}_{yz} . On définit aussi un pseudo-opérateur de conjugaison de charge C' qui est certes différent de son équivalent de la physique des particules mais qui s'en rapproche néanmoins. Les effets de ces opérateurs sur les opérateurs de destruction et de création \hat{c} et \hat{c}^\dagger pour $h = 0$ sont compilés dans le tableau 3.1.

Transformations discrètes	χ	σ_x	σ_y	σ_z
$P c_{\mathbf{k}\sigma} P^{-1} = c_{-\mathbf{k}\sigma}$	-1	+1	+1	+1
$T c_{\mathbf{k}\sigma} T^{-1} = \sigma c_{-\mathbf{k}-\sigma}$	-1	-1	-1	-1
$C' c_{\mathbf{k}\sigma} C'^{-1} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$	+1	-1	-1	-1
$\mathcal{T}_Q c_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{T}_Q^{-1} = c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}$	-1	+1	+1	+1
$\mathcal{M}_{zy} c_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{M}_{zy}^{-1} = c_{(-k_x, k_y, k_z)\sigma}$	-1	+1	-1	-1
$\mathcal{M}_{zx} c_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{M}_{zx}^{-1} = c_{(k_x, -k_y, k_z)\sigma}$	-1	-1	+1	-1

TABLE 3.1 Effets des opérations de symétries discrètes sur les opérateurs de création et de destruction du réseau ainsi que le changement de signe associé sur la chiralité χ et les matrices de Pauli de l'Hamiltonien 3.1 lorsque $h = 0$.

A partir de ce tableau, on peut retrouver la symétrie particule-trou du réseau discutée

plus tôt. En effet, lorsque $\mu = 0$, la transformation

$$(C'PT)c_{\mathbf{k}\sigma}(C'PT)^{-1} = \sigma c_{\mathbf{k}-\sigma}^\dagger, \quad (3.6)$$

laisse l'Hamiltonien 3.5 inchangé même lorsque $h \neq 0$.

Lorsque $h = 0$, les Hamiltoniens avec et sans interaction exhibent deux symétries caractérisées par la combinaison des opérateurs de translation $\mathcal{T}_{\mathbf{Q}}$ et des opérateurs miroirs :

$$(\mathcal{T}_{\mathbf{Q}}\mathcal{M}_{zy})c_{\mathbf{k}\sigma}(\mathcal{T}_{\mathbf{Q}}\mathcal{M}_{zy})^{-1} = c_{(-k_x+\pi, k_y+\pi, k_z+\pi)\sigma} \quad (3.7)$$

$$(\mathcal{T}_{\mathbf{Q}}\mathcal{M}_{zx})c_{\mathbf{k}\sigma}(\mathcal{T}_{\mathbf{Q}}\mathcal{M}_{zx})^{-1} = c_{(k_x+\pi, -k_y+\pi, k_z+\pi)\sigma}. \quad (3.8)$$

Le vecteur de translation \mathbf{Q} est une conséquence du caractère bipartite du réseau carré. Ainsi, ces deux symétries *échanget* les positions de nœuds d'une chiralité donnée avec celles de chiralité opposée et sont valables quelle que soit la valeur du potentiel chimique μ .

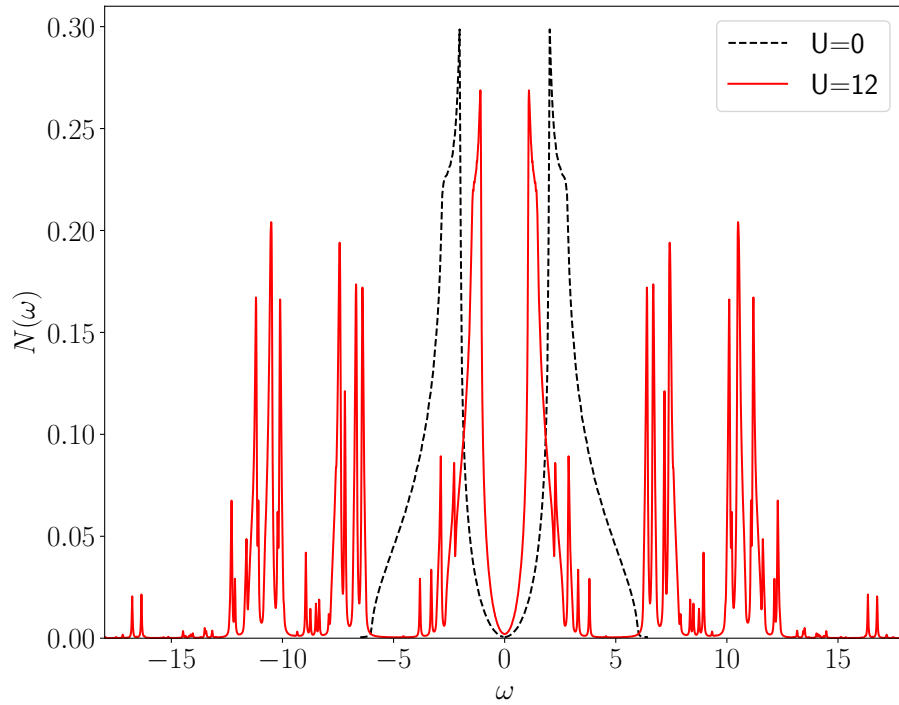


FIGURE 3.1 Densités d'états locales en fonction des fréquences réelles. En ligne noire pointillée, la densité d'états locale sans interaction et en ligne rouge continue, la densité d'états locale pour $U = 12$. La présence de pics très abrupts dans le cas avec interaction vient du faible nombre de sites de bain du solveur d'impureté.

Attardons-nous quelque peu sur la densité d'états locale. La figure 3.1 présente sur la même image la densité d'états locale en l'absence d'interaction et une densité d'états

locale pour une valeur finie du terme d'Hubbard. Le comportement quadratique au niveau de l'énergie de Fermi, fixé par convention à $\omega = 0$, marque la présence d'une phase semi-métallique en trois dimension. Ce comportement semi-métallique disparaît lorsque $|\omega| \gtrsim 2$ et laisse place à une géométrie de bandes qui s'apparente à celle d'un réseau cubique.

La ligne rouge continue représente le cas où le terme d'Hubbard est égal à la largeur de bande, soit $U = 12$. L'ajout d'une interaction d'Hubbard apporte plusieurs modifications à la densité d'états locale. Notons d'abord la présence des bandes supérieure et inférieure de Hubbard. Ces bandes de Hubbard correspondent à des excitations électroniques incohérentes et sont localisées autour de $\omega = \pm U/2$. La figure 3.1 peut être trompeuse sur le nombre de bandes d'Hubbard puisqu'il semble qu'une deuxième paire de bandes soit présente autour de $\omega = \pm U$. Cet artéfact visuel vient du faible nombre de sites de bain utilisé en diagonalisation exacte. En effet, un nombre fini de bain ne peut modéliser un continuum d'énergies d'excitations. On ne peut que l'approcher de façon de plus en plus fine à mesure que le nombre de bain est grand. Ce nombre restreint de sites de bain est aussi l'explication des nombreux petits pics abrupts dans la densité d'états.

De plus, il est remarquable que les propriétés de quasi-particules persistent à des valeurs élevées du terme d'Hubbard. En effet, l'approche des quasi-particules repose sur l'hypothèse que les excitations créées par l'ajout d'une particule dans un système interagissant peuvent être décrites en utilisant un formalisme similaire à celui des particules libres. Les interactions ont alors comme principaux effets de renormaliser l'énergie du système libre et de donner un temps de (demi-)vie aux particules du système, les quasi-particules. Dans le cas d'un système à une bande avec une self-énergie purement locale, l'approche des quasi-particules se traduit mathématiquement par la réécriture de la fonction de Green avec interaction

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega)} \quad (3.9)$$

comme suit :

$$G^{QP}(\omega) = \frac{Z}{\omega + Z(\mu - \Sigma'(\omega = 0)) - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - \frac{i}{2\tau}}, \quad (3.10)$$

avec $\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = Z\epsilon(\mathbf{k})$. Les termes Z et τ sont respectivement appelés poids et temps de demi-vie des quasi-particules :

$$Z^{-1} = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma'(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \quad (3.11)$$

$$\tau^{-1} = -2Z\Sigma''(\omega = 0). \quad (3.12)$$

Ainsi, le poids de quasi-particule repose sur un développement limité de la partie réelle de la self-énergie autour de l'énergie de Fermi alors que l'inverse du temps de demi-vie est

directement proportionnel à la partie imaginaire de la self-énergie. Cette dernière n'est pas développée en fréquence car elle n'a généralement pas de contributions au premier ordre¹ Dans le cas d'un système à plusieurs bandes comme c'est le cas dans les semi-métaux de Weyl, on préférera définir la fonction de Green des quasi-particules de la façon suivante [75] :

$$G^{Q.P}(\omega) = \mathbf{Z}^{\frac{1}{2}} [\omega + i\eta - \mathbf{H}^{Q.P}(\mathbf{k})]^{-1} \mathbf{Z}^{\frac{1}{2}} \quad (3.13)$$

avec l'Hamiltonien des quasi-particules :

$$H^{Q.P} = \mathbf{Z}^{\frac{1}{2}} [\mathbf{H}_0 - \mu\mathbf{I} + \Sigma'(\omega = 0)] \mathbf{Z}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.14)$$

Le poids des quasi-particule est maintenant une matrice et on néglige le temps de vie des quasi-particules dans cette approche qui sera utilisée plus en détail dans le chapitre 4 mais qui mérite d'être introduite ici.

Avec l'approche des quasi-particule en tête, on comprend pourquoi la densité d'états locale avec interaction ressemble fortement à la densité d'états sans interaction renormalisée par le poids de quasi-particule Z autour du niveau de Fermi. Ce comportement est habituel lorsque les interactions sont faibles par rapport à la largeur de bande W mais le fait qu'il soit encore valable lorsque le terme d'Hubbard devient comparable voire supérieur à W est plutôt inhabituel. On doit donc s'attendre à ce que l'approche des quasi-particules fonctionne sur une large gamme de valeur de U . Une explication de la persistance de l'approche des quasi-particules est proposée dans la section 3.2 par le biais du temps de demi-vie des fermions de Weyl dans l'approximation de la DMFT.

Cette persistance inhabituelle est aussi visible lorsque l'on compare notre modèle à un réseau cubique. Différentes propriétés telles que la self-énergie, le poids de quasi-particule et la double occupation sont comparées dans les figures 3.2(a), (b) et (c). La comparaison se fait de façon très naturelle puisque ces deux systèmes ont la même largeur de bandes. La figure 3.2(a) présente les parties imaginaires des self-énergies des deux réseaux en fonction des fréquences de Matsubara pour la même valeur de U . De part la pente à l'origine directement proportionnelle à $(1 - Z^{-1})$, il apparaît clairement que le réseau cubique est plus corrélé que le modèle de semi-métaux de Weyl. Le fait que le minimum de la partie imaginaire de la self-énergie du semi-métal de Weyl se situe à une fréquence de Matsubara supérieure à celle du minimum du réseau cubique signe aussi le fait que l'approche de quasi-particules s'étend sur une large plage de fréquences réelles. Cette affirmation se précise lorsque l'on regarde les autres grandeurs étudiées en fonction de U/W . Le fait

1. C'est le cas notamment dans la théorie de Fermi et pour les semi-métaux de Weyl en DMFT comme on le voit dans la section 3.2.

que la transition de Mott apparaît à une valeur plus faible de U/W (On a $U_{cl}^{cub} \approx 1.2W$ contre $U_{cl}^{SMW} \approx 1.7W$ pour le semi-métal de Weyl) et que Z et la double occupation soient systématiquement inférieurs dans le réseau cubique confirme l'affirmation précédente : *Les semi-métaux de Weyl ne sont pas des matériaux fortement corrélés [76].*

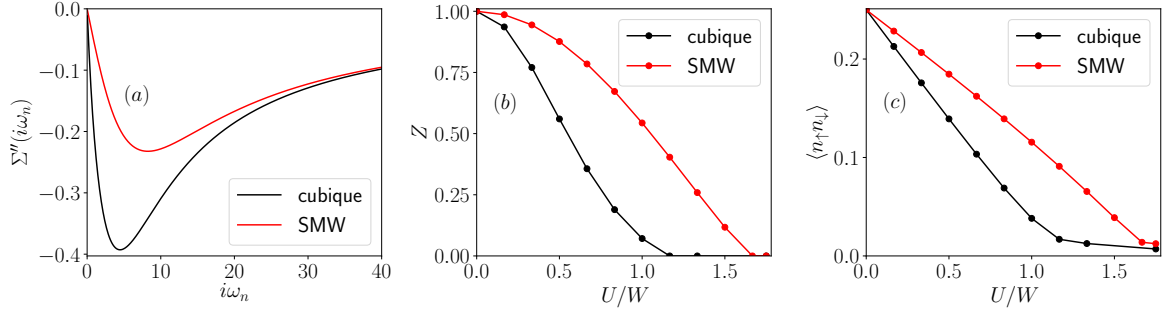


FIGURE 3.2 (a) Parties imaginaires des self-énergies du réseau cubique et du modèle de semi-métal de Weyl en fonction des fréquences de Matsubara. (b) et (c) Respectivement le poids de quasi-particule et la double occupation des deux modèles précédents en fonction de U/W .

3.1.3 Positions des nœuds et phase isolante

Nous avons déjà brièvement discuté de la façon dont le modèle sans interaction transite d'une phase semi-métallique à une phase isolante en passant par une phase intermédiaire où des nœuds de Weyl de chiralité opposée fusionnent. Qu'en est-il lorsque le système est en présence d'interaction de type Hubbard ? Deux scénarios aux physiques différentes sont possibles.

Lorsque aucun *déséquilibre* de densités électroniques entre les espèces de spin est présent dans le système sans interaction, c'est-à-dire lorsque l'on a : $\langle n_\uparrow \rangle_0 = \langle n_\downarrow \rangle_0$ et $\langle c_\uparrow^\dagger c_\downarrow \rangle_0 = \langle c_\downarrow^\dagger c_\uparrow \rangle_0 = 0$, l'interaction d'Hubbard ne change pas la position des nœuds de Weyl dans la zone de Brillouin. L'augmentation du terme d'Hubbard va entraîner par la même occasion une augmentation des corrélations électroniques et lorsque ces dernières sont trop importantes, la transition d'un semi-métal de Weyl vers isolant de Mott a lieu.

A contrario, lorsque les densités électroniques ne sont pas égales, les interactions affectent la position des nœuds de Weyl. Dans le cas de notre modèle sur réseau, la présence d'un terme Zeeman non nul h crée un déséquilibre entre les densités électroniques de chaque espèce de spin ($\langle n_\uparrow \rangle_0 \neq \langle n_\downarrow \rangle_0$). Cette différence de densité dans le modèle sans interaction est amplifiée par le diagramme de Hartree (cf. section 4.1) et cela entraîne un changement de positions des nœuds dû aux interactions.

Le mouvement des nœuds peut aussi s'expliquer par des arguments de symétries. Dans le cas particulier de notre modèle, les symétries présentées dans les équations 3.7 et 3.8 sont présentes en l'absence d'un terme Zeeman, h . Or, comme ces symétries échangent les positions de nœuds de chiralité différente et qu'elles ne sont pas affectées par la présence d'interaction, leur présence fixe la position des nœuds de Weyl quelle que soit la valeur de U . L'ajout d'un terme Zeeman brise ces symétries et donc permet le mouvement des nœuds dans la zone de Brillouin.

Deux cas de figures peuvent alors se produire :

- Les interactions arrivent à ouvrir un gap électronique en renormalisant suffisamment le terme h . Le système est alors un isolant de bande peuplé par une seule espèce de spin. Ce caractère ferromagnétique prévient une éventuelle transition de Mott, ce qui rend cet isolant insensible à l'interaction d'Hubbard.
- Les interactions n'arrivent pas à ouvrir le gap de bande avant que la transition de Mott apparaisse et le système peut alors passer d'une phase semi-métallique vers une phase d'isolant de Mott lorsque U est suffisamment grand.

Si les détails de la transition semi-métal-isolant de bande dépendent des détails microscopique du modèle, le mouvement des nœuds de Weyl dans la zone de Brillouin vient systématiquement d'un déséquilibre dans les densités électroniques qui se retrouve amplifié par les diagrammes d'Hartree ou de Fock. Dans les modèles présentés dans les équations 3.3 et 3.4 par exemple, c'est le diagramme de Fock qui renormalise le paramètre m et qui modifie par la même occasion la position des nœuds de Weyl.

Ainsi, le mouvement des positions des nœuds de Weyl en fonction des interactions n'est donc pas limité à la résolution spatiale de la self-énergie et peut-être pris en compte grâce à la DMFT ou des méthodes de champ moyen comme la méthode Hartree-Fock.

3.2 Comparaison du temps de demi-vie des quasi-particules avec d'autres méthodes numériques

Cette section a pour but de présenter quelques résultats de recherche sur les semi-métaux de Weyl avec interaction en mettant en exergue les différents résultats obtenus par différentes méthodes traitant les interactions.

3.2.1 De l'existence d'un liquide de Fermi marginal en théorie du champ moyen dynamiques

Un des résultats obtenus par Hofmann *et al.* est la présence d'un liquide de Fermi marginal dans un semi-métal de Weyl lorsque le potentiel chimique se trouve au niveau des nœuds [71]. Les liquides de Fermi marginaux sont une classe un peu particulière de liquide de Fermi dans le sens où la partie imaginaire de la self-énergie autour du niveau de Fermi se comporte non pas comme une fonction de ω^2 mais comme une fonction de $|\omega|$. Cette théorie a été développée pour tenter d'expliquer les propriétés de transport inhabituelles de certains supraconducteurs à haute température critique [77] notamment la dépendance linéaire en température de la résistivité. Le travail de Hofmann *et al.* s'appuie sur l'approximation de la phase aléatoire et sur une interaction à longue portée. Cela rend ardue la comparaison directe entre leurs résultats et ceux obtenus à l'aide de la DMFT.

Dans le matériel supplémentaire de l'article [73], les auteurs utilisent des notions de groupe de renormalisation pour en déduire que le temps de demi-vie des fermions de Weyl en présence d'une interaction de type Hubbard se comporte en $|\omega^5|$.

Qu'en est-il pour la DMFT? On peut se faire une bonne idée du temps de demi-vie en utilisant une sorte de *théorie des perturbations non-itérées*. En effet, lorsque $U = 0$, la relation d'auto-cohérence de la DMFT nous permet d'avoir une égalité stricte entre la fonction de Green de l'impureté et la fonction de Green locale du réseau :

$$\mathbf{G}^{\text{imp}}(i\omega_n) = \mathbf{G}_0(i\omega_n) \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{i\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{\Delta}(i\omega_n)} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}_0(\mathbf{k})}. \quad (3.16)$$

En prenant cela en compte et en utilisant une théorie des perturbation à l'ordre deux comme dans l'annexe A et en l'absence d'un terme Zeeman qui briserait la symétrie SU(2) étendue, on obtient la partie imaginaire des composantes diagonales de la self-énergie lorsque $\omega \geq 0$ [65] :

$$\tilde{\Sigma}''_{\sigma}(\omega) = -\pi U^2 \int_{-\omega}^0 d\epsilon_1 \int_0^{\omega+\epsilon_1} d\epsilon_2 \rho(\epsilon_1) \rho(\epsilon_2) \rho(\omega + \epsilon_1 - \epsilon_2) \quad (3.17)$$

avec ρ la densité d'états locale de l'impureté/du réseau (cf. équation 3.16). Lorsque la fréquence est suffisamment petite, seule la partie quadratique de la densité d'états locale contribue à l'intégrale et on peut utiliser la densité d'états d'un modèle effectif pour résoudre exactement l'équation 3.17. Les fonctions ρ ont alors l'expression mathématique suivante :

$$\rho(\epsilon) = \frac{N\epsilon^2}{2\pi^2 v_F^3} \quad (3.18)$$

où v_F est la vitesse de Fermi et N est le nombre de noeuds de Weyl dans la première zone de Brillouin. On obtient finalement :

$$\tilde{\Sigma}''(\omega) = -\frac{N^3 U^2 \omega^8}{40320 \pi^5 v_F^9}. \quad (3.19)$$

Cette formule n'est valable que dans la région où la densité d'états du réseau est celle de la densité d'états d'un semi-métal de Weyl, c'est-à-dire dans le cas de notre modèle lorsque ω est plus petit que $2t$. Outre le coefficient démesurément petit en face de la fréquence, cette formule explique la robustesse des propriétés de quasi-particules des semi-métaux dans l'approximation DMFT. En effet, le temps de demi-vie des particules présenté dans l'équation 3.12 devient démesurément grand ce qui justifie pleinement l'approximation des quasi-particules. De plus, il peut être prouvé qu'avec une dépendance en fréquence aussi exotique que ω^8 , une approche de quasi-particules est toujours valable avec notamment un poids de quasi-particule bien défini. Cette preuve est faite dans l'annexe C.

3.3 Résumé

Pour étudier les effets de l'interaction d'Hubbard dans les semi-métaux de Weyl, nous avons utilisé le modèle sur réseau présenté dans l'équation 3.5. Ce modèle comporte un certain nombre de symétries comme celles présentées dans les équations 3.7 et 3.8. la présence d'un terme Zeeman h entraîne leur brisure ce qui a d'importantes conséquences sur la position des noeuds et l'effet Hall anormal (cf. Chapitre 4).

En absence d'interaction, le modèle décrit dans l'équation 3.1 exhibe un nombre différent de noeuds de Weyl en fonction du paramètre h que l'on peut apparenter à un terme Zeeman. Dans ce travail de thèse, nous nous sommes limités à de petite valeur de h par rapport au terme de saut t . Dans ce régime, on retrouve quatre noeuds de Weyl situés aux positions $(0, \pi, \pm \arccos(h/2t))$ et $(\pi, 0, \pm \arccos(h/2t))$.

Le problème des semi-métaux de Weyl avec interaction est résolue à l'aide de la DMFT. Comme toute méthode numérique, la DMFT repose sur des approximations et des paradigmes qui ne sont pas adaptés à tout les systèmes physiques. Au vue des résultats de ce chapitre, l'utilisation de la DMFT dans le cas des semi-métaux de Weyl n'est pas fondamentalement mauvais choix. Malgré l'absence d'une dépendance en k de la self-énergie, cette méthode permet de rendre compte des mêmes résultats obtenus grâce à des méthodes sur amas. En effet, la DMFT permet d'expliquer le changement de position des noeuds de Weyl dû aux interactions. Le mécanisme derrière ce changement est relié aux diagrammes de

Hartree ou de Fock selon les détails microscopiques du système et ne nécessite donc pas l'utilisation d'une méthode résolue dans l'espace. En outre la persistance des propriétés de quasi-particules peut être soupçonnée dans des études utilisant la CPT ou la VCA [73, 74] car les propriétés dynamiques de la self-énergie ne sont pas mises en avant. Dans le cas de la DMFT, l'inverse du temps de demi-vie des fermions de Weyl est démesurément petit lorsque la fréquence est petite ce qui explique pourquoi la physique des semi-métaux de Weyl sous interactions à courte portée est essentiellement gouvernée par une physique des quasi-particules.

Cette conclusion peut paraître négative puisqu'elle nous pousse à étudier les semi-métaux de Weyl par le seul prisme de l'approche des quasi-particules et de faire fi des propriétés dynamiques de la self-énergie. Elle est néanmoins nécessaire pour éclaircir quelque peu la question des interactions à basse température dans les semi-métaux de Weyl et elle souligne la pertinence d'une étude des semi-métaux de Weyl sous champ car l'ajout d'un champ magnétique change la densité d'états locale et donne un caractère métallique au système. Ce changement de caractère peut avoir de grosses répercussions sur les propriétés physiques des semi-métaux de Weyl soumis à un champ magnétique externe.

Chapitre 4

Effet Hall anormal et aimantation orbitale dans les semi-métaux de Weyl interagissants

Les travaux présentés dans ce chapitre font l'objet d'un article [78].

Introduction

L'effet Hall anormal (EHA) et l'aimantation orbitale ont un point commun dans l'histoire des sciences. Outre leur *proximité* physique, ces deux phénomènes ont été découverts il y a bien longtemps et n'ont trouvé de théories convenables les expliquant que récemment. Dans le cas de l'EHA, Hall avait déjà remarqué en 1881 [79] que l'effet qui porte son nom était bien plus intense lorsque le conducteur était un ferro-aimant au lieu d'un métal non aimanté. Il aura fallu attendre plus d'un siècle après cette découverte expérimentale pour isoler théoriquement les origines physiques qui la constituent. Cet effet est la somme de trois grandes contributions : l'une est purement topologique et les deux autres sont dues à un mélange de couplage spin-orbite et de processus de diffusion sur des impuretés.

L'aimantation orbitale est un phénomène bien connu en physique. Elle tire son origine du mouvement cyclotronique des électrons soumis à un champ magnétique externe. Des théories extrêmement robustes pour calculer l'aimantation orbitale dans les atomes, les molécules voire des réseaux finis sont connus depuis longtemps. Cependant, il aura fallu attendre 2005 pour que deux articles résolvent indépendamment le problème de l'aimantation orbitale dans des réseaux périodiques [80, 81]. L'arrivée tardive de ce que l'on appelle aujourd'hui la *théorie moderne de l'aimantation orbitale* (en anglais, *modern theory of orbital*

magnetization) ne s'explique pas totalement par la compréhension récente de la physique topologique puisque l'aimantation orbitale n'est pas une quantité protégée topologiquement. Elle a cependant des liens très forts avec des quantités topologiques notamment avec le premier nombre de Chern et la conductivité anormale de Hall.

Dans les semi-métaux de Weyl, l'intérêt pour ces deux quantités physiques est motivé expérimentalement par le matériau Mn_3Sn [39]. Comme discuté dans la sous-section 1.3.2, ce semi-métal, dont les corrélations électroniques semblent importantes, présente un effet Hall anormal important même à température ambiante [41]. De plus, comme il s'agit d'un antiferro-aimant avec un ferromagnétisme faible, l'aimantation de spin ne devrait pas être importante, rendant plus facile la mesure de l'aimantation orbitale. Ces trois faits expérimentaux : effet Hall anormal important, fortes corrélations électroniques et faible aimantation de spin, font de Mn_3Sn un candidat de choix pour étudier expérimentalement les liens entre l'EHA et l'aimantation orbitale dans un semi-métal de Weyl corrélé et dont la symétrie par renversement du temps est brisée.

D'un point de vue théorique, la modélisation de la physique de ce matériau ne peut se cantonner à des modèles effectifs avec des interactions traitées dans les approximations Hartree-Fock ou de la phase aléatoire et c'est pour cela que l'on se propose d'étudier le lien entre ces deux quantités physique dans un semi-métal de Weyl avec interaction d'Hubbard résolue grâce à la DMFT. La section 4.1 est consacrée à l'étude de l'EHA dans les semi-métaux de Weyl ferromagnétiques. On y aborde les avancées de ces dernières années sur la nature topologique de l'EHA en l'absence d'interaction (sous-section 4.1.2) et une discussion sur l'effet des interactions d'Hubbard est présentée dans la sous-section 4.1.3. La section 4.2 est consacrée à l'aimantation orbitale. La sous-section 4.2.1 introduit la formule de Sřředa qui lie intimement cette dernière à la conductivité anormale de Hall en l'absence d'interaction. Les interactions permettent d'ébranler cette relation et ouvrent la porte à une compétition inédite entre topologie et corrélations électroniques que l'on présente dans la sous-section 4.2.2.

Les calculs du semi-métal de Weyl avec interaction d'Hubbard dans le paradigme de la DMFT ayant été présentés dans le chapitre 3, nous ne les commenterons pas ici. Le lecteur devra seulement retenir que nous avons utilisé l'Hamiltonien présenté équation 3.5 résolu à l'aide de la DMFT et de la diagonalisation exacte avec cinq sites de bain et à $\beta = 80$. On a aussi utilisé 1024 fréquences de Matsubara pour évaluer la fonction de distance. Pour satisfaire la relation d'auto-cohérence, un seuil de tolérance absolu en dessous duquel la fonction de distance est considérée comme minimisée est fixé à $0.00002t$. Les quantités d'énergies sont toutes exprimées en fonction de l'unité d'énergie t que l'on fixera égale à un. Les unités d'énergie sont celles d'Hartree.

4.1 L'effet Hall anormal

L'effet Hall anormal est par définition la présence d'un courant transverse sans dissipation en réponse à un champ électrique. À la différence de la conductivité de Hall *normale*, la conductivité anormale de Hall ne nécessite pas la présence d'un champ magnétique pour acquérir une valeur non nulle.

Si le champ électrique est dans la direction y , on peut obtenir l'expression mathématique de la conductivité anormale de Hall σ_{xy} à partir d'un développement en puissance de fréquences de Matsubara de la fonction de corrélation courant-courant Π_{xy} . Cette méthode est valable car l'effet Hall anormal est une quantité thermodynamique sans dissipation. Le prolongement analytique de $\Pi_{xy}(i\nu_n)$ n'est alors pas nécessaire. La fonction de corrélation courant-courant s'écrit en terme d'opérateurs [82] :

$$\Pi_{xy}(\tau) = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} -\langle T_\tau J_x^\dagger(\mathbf{q}, \tau) J_y(\mathbf{q}, 0) \rangle \quad (4.1)$$

$$\Pi_{xy}(i\nu_n) = \int_0^\beta d\tau \Pi_{xy}(\tau) e^{i\nu_n \tau}, \quad (4.2)$$

où les j_α sont les opérateurs densité de courant. La formule 4.2 s'écrit à l'aide de fonctions de Green et d'opérateurs vitesses de la façon suivante :

$$\Pi_{xy}(i\nu_n) = -\frac{1}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}\omega_m} \text{Tr} \left[\mathbf{v}_x(\mathbf{k}) \mathbf{G}(i\omega_m + i\nu_n, \mathbf{k}) \frac{\partial \mathbf{G}^{-1}(i\omega_m, \mathbf{k})}{\partial k_y} \mathbf{G}(i\omega_m, \mathbf{k}) \right] \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} &\approx \Pi_{xy}(0) + \\ &\quad \underbrace{\frac{1}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}\omega_m} \text{Tr} \left[\frac{\partial \mathbf{G}^{-1}(i\omega_m, \mathbf{k})}{\partial k_x} \mathbf{G}(i\omega_m, \mathbf{k}) \frac{\partial \mathbf{G}^{-1}(i\omega_m, \mathbf{k})}{\partial i\omega_n} \mathbf{G}(i\omega_m, \mathbf{k}) \frac{\partial \mathbf{G}^{-1}(i\omega_m, \mathbf{k})}{\partial k_y} \mathbf{G}(i\omega_m, \mathbf{k}) \right]}_{\text{premier ordre}} i\nu_n \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (4.4)$$

Les opérateurs de vitesse sont définis comme $\mathbf{v}_i = -\partial_{k_i} \mathbf{H}_0$, où \mathbf{H}_0 est l'Hamiltonien sans interactions. Les fonctions de Green \mathbf{G} comportent les interactions et s'écrivent de façon générale comme :

$$\mathbf{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) = ((i\omega_n + \mu)\mathbf{I} - \mathbf{H}_0(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega_n, \mathbf{k}))^{-1}. \quad (4.5)$$

Pour calculer l'équation 4.3 de façon rigoureuse, il faut être capable de calculer les corrections de vertex $\partial_{k_i} \mathbf{G}^{-1}$. Ces derniers sont extrêmement difficiles à calculer et ne contribuent pas au vertex vitesse lorsque la self-énergie ne dépend pas du vecteur d'onde. En effet, l'intégration sur les vecteur d'onde fait disparaître les corrections et on peut se contenter des vertex «nus»,

c'est-à-dire $\partial_{k_i} \mathbf{G}^{-1} = -\partial_{k_i} \mathbf{H}_0 = \mathbf{v}_i$. La dérivation selon les fréquences de Matsubara ω_n est prise en compte «exactement». L'adjectif «exactement» est entre guillemets dans le sens où la dérivée de la self-énergie par rapport aux fréquences de Matsubara se fait à l'aide de la méthode des différences finies qui fonctionne bien lorsque les fréquences de Matsubara ne sont pas trop espacées entre elles, c'est-à-dire, à basse température. Ainsi, la formule de la conductivité de Hall que l'on utilisera dans la suite de ce chapitre est :

$$\sigma_{xy} = -\text{Im} \frac{1}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_m} \text{Tr} \left[\mathbf{v}_x(\mathbf{k}) \mathbf{G}(i\omega_m, \mathbf{k}) \frac{\partial \mathbf{G}^{-1}(i\omega_m, \mathbf{k})}{\partial i\omega_n} \mathbf{G}(i\omega_m, \mathbf{k}) \mathbf{v}_y(\mathbf{k}) \mathbf{G}(i\omega_m, \mathbf{k}) \right], \quad (4.6)$$

avec les fonctions de Green de la DMFT

$$G(i\omega_n, \mathbf{k}) = [(i\omega_n + \mu)\mathbf{I} - \mathbf{H}_0(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega_n)]^{-1}. \quad (4.7)$$

Le cas sans interaction est assez intéressant à dériver puisqu'il nous renseigne sur les différentes composantes qui constituent l'EHA. À partir de l'équation 4.6, on a :

$$\sigma_{xy} = -\text{Im} \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} [\mathbf{v}_x \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{v}_y \mathbf{G}] \quad (4.8)$$

$$= -\text{Im} \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \sum_{n, m} \text{Tr} \left[\frac{v_x^{n, m} v_y^{m, n}}{(i\omega_n - \xi_m)^2 (i\omega_n - \xi_n)} \right] \quad (4.9)$$

$$= -\text{Im} \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \sum_{n, m} \text{Tr} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{v_x^{n, m} v_y^{m, n}}{(i\omega_n - \xi_m)(i\omega_n - \xi_n)} \right) \right], \quad (4.10)$$

où $v_i^{n, m} = \langle n | \mathbf{v}_i | m \rangle$ sont les éléments de matrice (m, n) des opérateurs de vitesse dans la base des bandes, n et m étant ici des indices de bandes et $\xi_n = \epsilon_n(\mathbf{k}) - \mu$. On omet d'écrire les autres nombres quantiques comme les vecteurs moments \mathbf{k} notamment dans les fonctions d'ondes pour des raisons de lisibilité. La somme sur les fréquences de Matsubara nous donne finalement :

$$\sigma_{xy} = -\text{Im} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\substack{n, m \\ m \neq n}} \text{Tr} \left[\frac{v_x^{n, m} v_y^{m, n}}{(\xi_n - \xi_m)^2} [n_F(\xi_m) - n_F(\xi_n)] - \frac{v_x^{n, m} v_y^{m, n}}{(\xi_n - \xi_m)} \frac{\partial n_F(\xi_m)}{\partial \xi_m} \right], \quad (4.11)$$

où $n_F(\xi) = 1/(1 + \exp(\beta\xi))$ est la fonction de Fermi-Dirac.

À suffisamment basse température, le dernier terme de droite de l'équation 4.11 est directement relié à la surface de Fermi puisque la dérivée de la distribution de Fermi-Dirac peut être approximée par un delta de Dirac $\delta(\xi_m)$. Ce terme n'aura donc un impact significatif que lorsque la densité d'états au niveau de Fermi sera importante. Le premier terme de droite

est quant à lui directement relié à la topologie du système. En effet, on reconnaît le tenseur de la courbure de Berry [20] pondéré par la distribution de Fermi-Dirac. Ainsi, lorsque la courbure de Berry est non nulle, c'est-à-dire, lorsque la topologie du système est non triviale, on aura une réponse topologique que l'on appelle *réponse intrinsèque*. Aujourd'hui, la courbure de Berry et les différentes quantités qui en découlent, comme par exemple le nombre de Chern [20], sont bien comprises des physiciens mais ce n'était pas forcément le cas 30 ans plus tôt¹.

4.1.1 Le cas des semi-métaux de Weyl ferromagnétiques

La topologie non triviale des semi-métaux de Weyl, et plus particulièrement des semi-métaux de Weyl ferromagnétiques, peut entraîner un EHA. Pour le comprendre, il faut se rappeler que dans l'espace réciproque, les nœuds de Weyl peuvent être vus comme des *monopoles magnétiques* dont le champ magnétique associé est la courbure de Berry.

Prenons l'exemple où deux nœuds de Weyl de chiralité opposée sont séparés dans l'espace réciproque par un vecteur \mathbf{b} dans la direction z allant du nœud de chiralité négative à celui de chiralité positive, comme illustré dans la figure 4.1. La région entre les deux nœuds peut être vue comme un empilement d'isolants de Chern bidimensionnels, chacun de ces isolants contenant un nombre de Chern C qui correspond au flux de la courbure de Berry des nœuds sur le plan de l'isolant. Dans notre cas simple, on définit le nombre de Chern de l'isolant situé dans la tranche $[k_z, k_z + dk_z]$ de la façon suivante :

$$C(k_z) = \frac{1}{2\pi} \iint dk_x dk_y \Omega(k_x, k_y, k_z), \quad (4.12)$$

avec $\Omega(\mathbf{k})$, la courbure de Berry du système. Chacun des isolants de Chern contribue à la partie intrinsèque de la conductivité anormale de Hall [84, 6, 32, 23, 25]. Ainsi, dans notre exemple, la partie intrinsèque de la conductivité anormale de Hall, c'est-à-dire la partie due à la topologie des semi-métaux de Weyl, s'écrira :

$$\sigma_{xy} = \frac{Cb}{2\pi^2}. \quad (4.13)$$

Dans le cas de plusieurs nœuds de Weyl dans la zone de Brillouin, on peut définir un vecteur effectif $\mathbf{b}_{\text{eff}} = \sum_i \chi_i \mathbf{b}_i$ où χ_i est la chiralité du i -ème nœud de Weyl et \mathbf{b}_i , sa position par rapport à une origine arbitraire.

1. Il est ironique de souligner que c'est la découverte d'un autre effet Hall, l'effet Hall quantique [83], qui a stimulé la recherche de la physique topologique et qui a aidé à mieux comprendre l'effet Hall anormal.

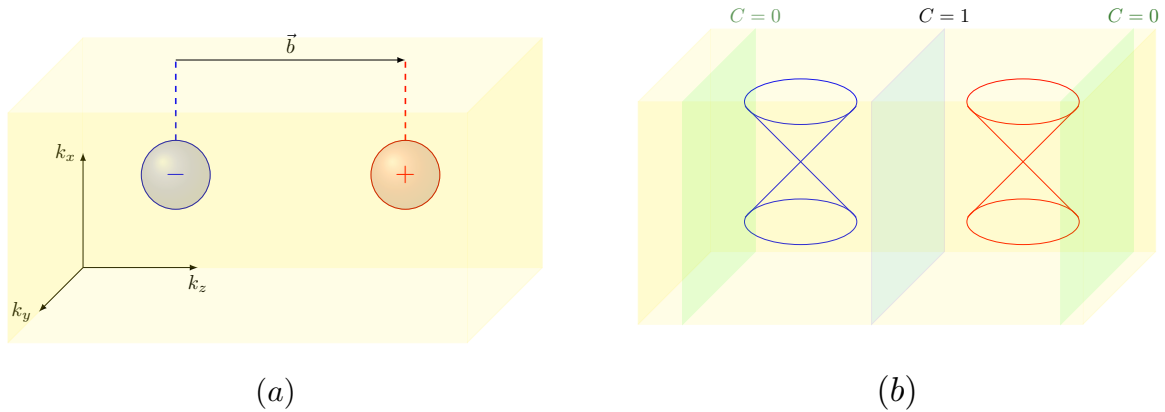


FIGURE 4.1 a) Schéma de deux nœuds de Weyl de chiralité opposée séparés par un vecteur \vec{b} . La direction de ce dernier est définie comme allant du nœud de chiralité négative à celui de chiralité positive. b) Exemple d'isolants de Chern dépendamment de la position par rapport aux nœuds de Weyl.

Cette réponse topologique ne prend pas en compte les autres contributions possibles à la conductivité de Hall. En effet, l'équation 4.13 ne concerne que la contribution de la courbure de Berry alors que l'on doit tenir compte des contributions venant de la surface de Fermi et/ou des impuretés dans le matériau. Fort heureusement, il a été démontré que lorsque le potentiel chimique est proche des nœuds de Weyl, la conductivité anormale de Hall était essentiellement due à sa contribution topologique [85]. Par «proche des nœuds de Weyl», on entend le fait que le potentiel chimique soit au niveau des bandes linéaires et que la surface de Fermi se décompose en petites *poches* déconnectées. Si tel est le cas, les contributions de la surface de Fermi et donc des contributions dissipatives sont négligeables.

Un lecteur non habitué de la physique topologique pourrait se poser la question de la différence entre l'effet Hall anormal topologique et l'effet Hall quantique. Le fait de rajouter un champ magnétique externe perpendiculaire à un gaz d'électron bidimensionnel va induire une phase isolante dans le centre du gaz et, comme conséquence à ce changement topologique de l'énergie de dispersion, des états de bord apparaissent [86, 87]. Dans un isolant de Chern, la topologie est proche de ce gaz d'électron 2D soumis à un champ magnétique. En fait comme leur nom l'indique, en deux dimensions, un isolant de Chern est déjà un isolant dans sa surface et il possède des états de bords. Cette topologie particulière peut être obtenue grâce à un couplage spin-orbite et à une brisure de la symétrie par renversement du temps due à une phase magnétique [88]. Ainsi, l'effet Hall anormal topologique (auss appelé effet Hall anormal quantique) et l'effet Hall quantique sont dus à des états de bords, mais la façon d'obtenir ces états repose sur des physiques différentes.

La présence d'un effet Hall anormal dont l'expression topologique viendrait de la

séparation des nœuds de Weyl dans la zone de Brillouin est un trait partagé par la plupart des modèles jouets de semi-métaux de Weyl sur réseau. Par exemple, dans le cas du modèle sur réseau utilisé dans l'article de Witczak-Krempa *et al.* [73] et présenté à l'équation 3.3, le semi-métal exhibe une conductivité transverse σ_{yz} non nulle. Une étude plus approfondie des détails microscopiques du modèle montre que ce dernier (tout comme celui de Laubach *et al.* [74]) présente une phase ferromagnétique le long de la direction x . Cela se remarque notamment par le fait que les moyennes $\langle c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow} \rangle$ et $\langle c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} \rangle$ ne sont pas nulles et réelles. Ainsi, le choix des détails microscopiques du modèle jouet du réseau ne change pas la physique du problème, ce qui est de bonne augure puisque l'on s'intéresse aux propriétés topologiques qui sont insensibles aux détails microscopiques des modèles utilisés.

4.1.2 Modèle sur réseau et absence d'interaction

Pour calculer l'EHA, on utilise le modèle sur réseau de l'équation 3.1 déjà présenté dans le chapitre 3. Le terme h peut être vu physiquement comme un terme Zeeman qui va nous permettre de «contrôler» le ferromagnétisme de notre modèle. Vérifions d'abord les affirmations de la section précédente sur notre modèle. Lorsque h est égal à zéro, c'est-à-dire, lorsque le semi-métal n'exhibe aucune aimantation de spin, le vecteur effectif vaut $\mathbf{b}_{\text{eff}} = (0, 0, 2\pi)$. Il est donc équivalent au vecteur nul dans la première zone de Brillouin, ce qui implique que la conductivité anormale de Hall est nulle.

Le fait que la conductivité de Hall soit nulle lorsque $h = 0$ peut aussi se comprendre grâce aux symétries du système. En effet, comme nous l'avons déjà discuté dans la section 3.2, les symétries 3.7 et 3.8 changent le signe des valeurs propres de l'opérateur chiralité. Ce changement de signe dans la chiralité des nœuds entraîne *de facto* un changement de signe du vecteur \mathbf{b} et par la même occasion, de la contribution intrinsèque de σ_{xy} (cf. Équation 4.13). La présence de ces symétries impose donc une conductivité nulle dans notre système.

Lorsque $h \neq 0$, ces symétries sont brisées et la conductivité de Hall acquiert une valeur non nulle dont on peut calculer l'expression grâce à des modèles effectifs. En utilisant une approche hybride où on développe les composantes k_x et k_y autour des nœuds de Weyl mais où la dépendance en k_z reste inchangée, on obtient les deux Hamiltoniens effectifs suivants :

$$H_{\pm}^{\text{eff}}(q_x, q_y, k_z) = (h - 2t \cos(k_z))\sigma_z \pm 2tq_x\sigma_x \mp 2tq_y\sigma_y. \quad (4.14)$$

Ces deux Hamiltoniens correspondent à des modèles effectifs pour les paires de nœuds $(0, \pi, \pm \arccos(h/2))$ et $(\pi, 0, \pm \arccos(h/2))$, respectivement. A partir de ces derniers, on peut calculer la courbure de Berry pour chacune des paires de nœuds de Weyl. La composante z

de cette dernière est la même pour les deux Hamiltoniens de l'équation 4.14 ce qui nous donne au total :

$$\Omega_-^z((q_x, q_y, k_z)) = -2 \frac{2t^2 (h - 2t \cos(k_z))}{((h - 2t \cos(k_z))^2 + 4t^2 q_x^2 + 4t^2 q_y^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (4.15)$$

Ici, q_x et q_y sont les déviations le long des directions x et y autour des nœuds.

La conductivité anormale de Hall s'écrit alors à demi-remplissage et à température nulle :

$$\sigma_{xy}^{\text{eff}} = \frac{1}{8\pi^3} \iiint d^3k \Omega_-^z(\mathbf{k}) \quad (4.16)$$

$$= -\frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \text{sign}(h - 2t \cos(k_z)) \quad (4.17)$$

$$= -\frac{1}{\pi^2} \arcsin\left(\frac{h}{2t}\right), \quad (4.18)$$

où la fonction sign est la fonction qui renvoie le signe de son argument. De façon surprenante, l'accord entre cette formule effective et le calcul avec l'énergie de dispersion totale est très bon. On a tracé dans la figure 4.2(a) la conductivité anormale de Hall à partir de l'équation 4.11 en prenant en compte l'ensemble du réseau et sa valeur effective présentée dans l'équation 4.18. On remarque que l'accord est excellent sur toute la plage de valeur de $h \in [0, 2]$.

On pourrait se demander ce qu'il se passe lorsque $h > 2$. La réponse est simple : lorsque h est exactement égal à 2, on a une fusion des nœuds de Weyl et la formule 4.18 est toujours bien définie. Lorsque $2 < h < 6$, le système n'a plus le même nombre de nœuds et ces derniers ne sont plus situés aux mêmes points sur le plan Oxy . La formule de la courbure de Berry vue dans l'équation 4.15 est alors caduque tout comme la formule 4.18 qui en découle.

Enfin, lorsque l'on fait varier le potentiel chimique μ loin du demi-remplissage, on observe une faible variation de la conductivité anormale de Hall (cf. figure 4.2(b) et (c)). En effet, la conductivité commence à dévier significativement de sa valeur effective lorsque μ dépasse la limite des bandes linéaires. Notre modèle étant un modèle sur réseau, cette non-linéarité arrive naturellement lorsque l'on s'éloigne des nœuds de Weyl. La figure 4.2(c) illustre parfaitement nos propos. On a tracé la densité d'états de notre modèle sur réseau dans la région $\omega \in [-2, 2]$. La figure en pointillé représente la densité d'états d'un modèle effectif de semi-métal de Weyl dont la vitesse de Fermi est la même que celle de notre modèle sur réseau au niveau des nœuds. On remarque que c'est à partir du moment où les densités d'états s'éloignent l'une de l'autre que la conductivité anormale de Hall commence à dévier significativement de sa valeur à $\mu = 0$.

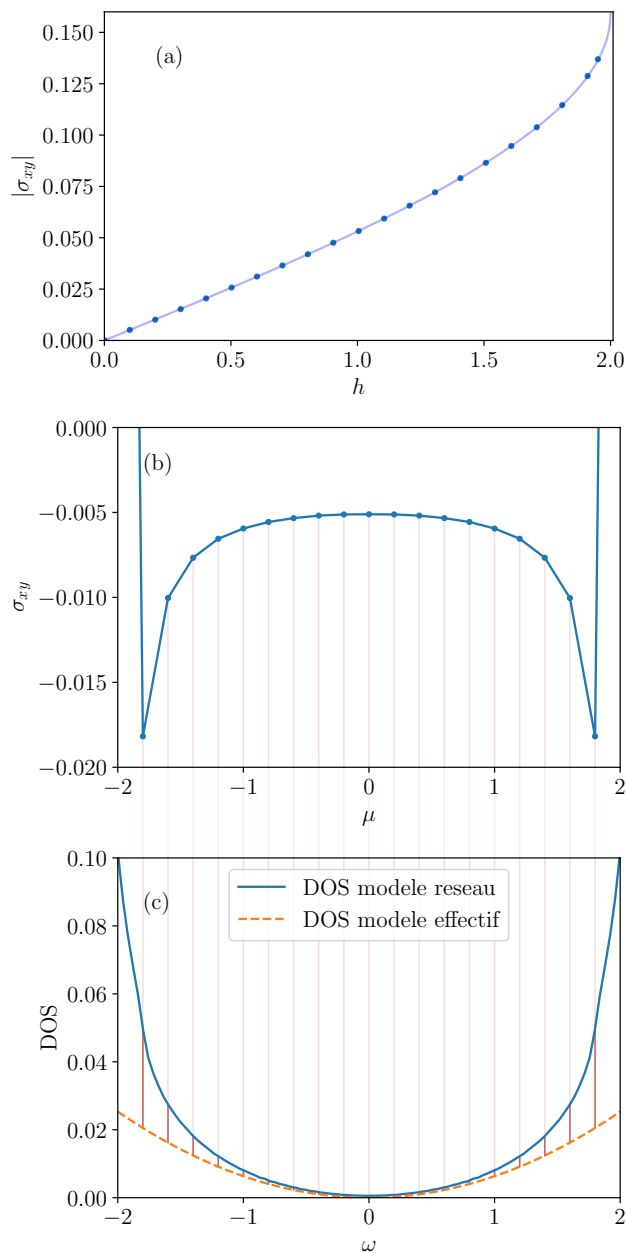


FIGURE 4.2 a) Valeur absolue de la conductivité anormale de Hall en fonction du terme Zeeman h . Les points sont les résultats numériques de l'équation 4.11 sur le réseau alors que la ligne continue est la conductivité effective 4.18 calculée analytiquement. b) Conductivité anormale de Hall σ_{xy} en fonction du potentiel chimique μ . La conductivité reste relativement stable tant que les bandes sont relativement linéaires. Cela se remarque notamment en comparant les densités d'états. c) Densité d'états du modèle sur réseau et du modèle effectif. On remarque que les densités d'états divergent l'une de l'autre indiquant par la même occasion le début d'une non-linéarité du modèle sur réseau.

4.1.3 Effet d'interaction de type Hubbard sur l'effet Hall anormal

Bien souvent, l'effet des interactions sur le transport électronique est de renormaliser les conductivités par le poids de quasi-particules ce qui entraîne une diminution de leur valeur. Cependant, cela n'est pas le cas pour la conductivité anormale de Hall dans les semi-métaux de Weyl ferromagnétiques. En effet, il semble que σ_{xy} augmente lorsque les interactions augmentent comme le montre la figure 4.3.

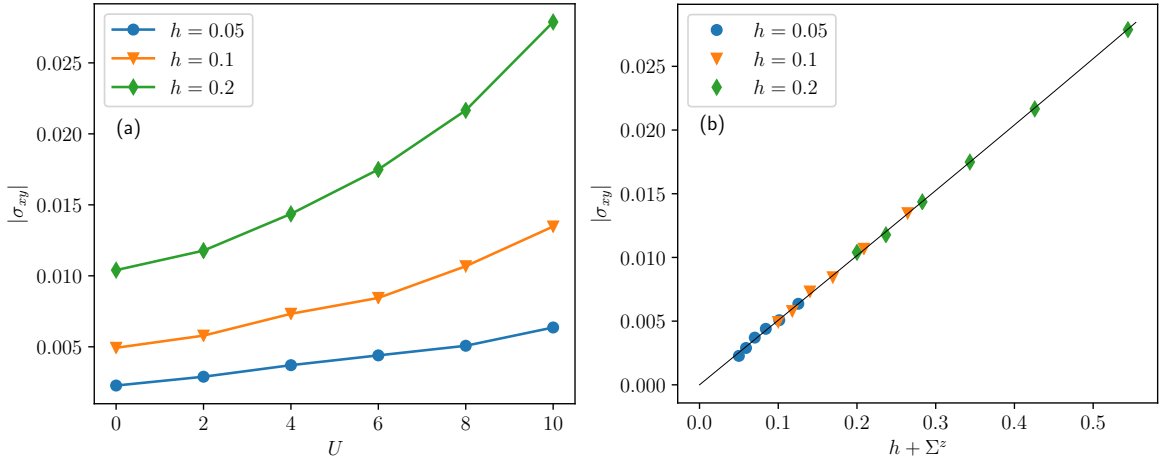


FIGURE 4.3 a) Valeur absolue de la conductivité anormale de Hall en fonction du terme d'Hubbard U . Chaque point est calculé en utilisant la DMFT à demi remplissage et trois valeurs de départ du terme Zeeman h sont présentés. b) Même points que pour la figure (a) tracés en fonction du terme $h + \Sigma^z$. La ligne continue est la fonction $x \mapsto \arcsin(x/2)/\pi^2$.

Pour comprendre ce phénomène, on peut aborder l'effet des interaction avec une approche de quasi-particules.

Dans le paradigme des quasi-particules, la fonction de Green s'écrit pour des fréquences de Matsubara autour de 0 comme suit :

$$\mathbf{G}^{QP}(i\omega_n) = \mathbf{Z}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{i\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}^{QP}} \right) \mathbf{Z}^{\frac{1}{2}}, \quad (4.19)$$

où la matrice \mathbf{Z} est la matrice des poids de quasi-particules et la matrice \mathbf{H}^{QP} est l'Hamiltonien des quasi-particules présenté dans l'équation 3.14.

Dans cette approche et lorsque h est non nul, le terme d'Hubbard U change la position des nœuds de Weyl. En effet, les nouvelles positions des nœuds de Weyl sont $(0, \pi, \pm \arccos(\tilde{h}/2t))$ et $(\pi, 0, \pm \arccos(\tilde{h}/2t))$, où $\tilde{h} = h + \Sigma^z$ est le terme Zeeman renormalisé par les interactions. Pour obtenir cette expression, nous avons réécrit la self-énergie comme suit : $\Sigma'(\omega = 0) =$

$\Sigma^z \sigma^z + \Sigma^I \mathbf{I}$, avec $\Sigma^z = (\Sigma_{\uparrow\uparrow} - \Sigma_{\downarrow\downarrow})/2$ et $\Sigma^I = (\Sigma_{\uparrow\uparrow} + \Sigma_{\downarrow\downarrow})/2$. Ces deux parties de la self-énergie contribuent respectivement dans la renormalisation du potentiel chimique μ et du terme Zeeman h .

A partir des fonctions de Green 4.19, on peut prouver que le poids des quasi-particules n'a aucun effet sur la contribution topologique de la conductivité de Hall à basse température. En effet, dans l'hypothèse où la matrice de poids spectral \mathbf{Z} est proportionnelle à la matrice identité, hypothèse vérifiée à partir des résultats de la DMFT, c'est-à-dire que ses composantes sont égales ($Z_{\uparrow\uparrow} = Z_{\downarrow\downarrow} = Z$), on peut réécrire la fonction de Green des quasi-particules comme suit : $\mathbf{G}^{QP} = Z \tilde{\mathbf{G}}$, avec $\tilde{\mathbf{G}} = (i\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{H}^{QP})^{-1}$. En suivant les mêmes étapes que pour l'équation 4.11, la conductivité anormale de Hall des quasi-particules s'écrit :

$$\sigma_{xy}^{QP} = -\text{Im} \frac{Z^2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\substack{n,m \\ m \neq n}} \text{Tr} \left[\frac{v_x^{n,m} v_y^{m,n}}{(\xi_n^{QP} - \xi_m^{QP})^2} [n_F(\xi_m^{QP}) - n_F(\xi_n^{QP})] - \frac{v_x^{n,m} v_y^{m,n}}{(\xi_n^{QP} - \xi_m^{QP})} \frac{\partial n_F(\xi_m^{QP})}{\partial \xi_m^{QP}} \right]. \quad (4.20)$$

Les énergies de dispersion des quasi-particules ξ^{QP} s'écrivant comme le produit du poids spectral Z et de ξ , il devient clair que la seule dépendance en Z de la partie proportionnelle à la courbure de Berry se trouve dans les distributions de Fermi-Dirac. À suffisamment basse température, il n'y a donc aucun effet du poids des quasi-particules dans la partie topologique de σ_{xy}^{QP} . La figure 4.3(b) illustre nos propos. En traçant les conductivités anormales de Hall calculées avec la self-énergie complète en fonction de $\tilde{h} = h + \Sigma^z$, on remarque qu'elles se placent toutes sur la même "droite" quelque soit la valeur initiale de h . Cette "droite" n'en est pas vraiment une puisqu'il s'agit de la formule 4.18 à laquelle on a fait les substitutions $h \rightarrow Z(h + \Sigma^z)$ et $t \rightarrow Zt$ et qui a un comportement linéaire autour de 0.

4.1.4 Origines de Σ^z et Σ^I

On pourrait se poser la question de l'origine de Σ^z et Σ^I ? Pour répondre à cette question, on se propose de calculer la self-énergie grâce à une théorie des perturbations à l'ordre deux en U , la contribution au premier ordre étant simplement le terme d'Hartree :

$$\Sigma_\sigma^{(1)} = U \left(n_\sigma - \frac{1}{2} \right). \quad (4.21)$$

La contribution au second ordre est obtenue en utilisant l'approche introduite dans l'annexe A.2 en utilisant la fonction de Green du réseau sans interaction. Pour obtenir une self-énergie locale, nous faisons l'hypothèse qu'elle correspond simplement à la moyenne sur les moments \mathbf{k} de la self-énergie perturbative. Cette approche donne une certaine satisfaction sur une grande plage de fréquences de Matsubara comme le montrent les figures 4.4(a) et (b) où elle est comparée à la self-énergie de la DMFT pour $U = 2$. Cependant, si l'on trace Σ^z en fonction de U comme dans la figure 4.4(c), il est

clair que l'accord n'est pas parfait pour des valeurs de U supérieures à deux. Ce fait laisse penser que le développement en U de la self-énergie requiert d'aller à des ordres supérieurs pour Σ^z .

La comparaison pour Σ^I est quant à elle pleinement satisfaisante loin du demi-remplissage. En effet, à demi rempli, Σ^I est nul quelque soit la valeur de U en DMFT et en théorie des perturbations. Une comparaison entre les valeurs de la self-énergie obtenue grâce à la DMFT et celle obtenue grâce à la théorie des perturbations pour $\mu = -0.5$ est présentée figure 4.4(d). L'accord est extrêmement bon même pour $U > 2$.

À partir de cette théorie des perturbations, il semble que Σ^z doit son origine à des contributions en U supérieures à deux alors que Σ^I s'explique principalement par le diagramme présenté dans la section A.2.

En conclusion, l'approche des quasi-particules fonctionne suffisamment bien à demi-remplissage dans les semi-métaux de Weyl ferromagnétique pour expliquer la conductivité anormale de Hall. Il est intéressant de remarquer que l'interaction d'Hubbard augmente la valeur de la conductivité anormale de Hall. À cela, plusieurs interprétations peuvent être présentées pour expliquer ce phénomène. La première est purement topologique : en augmentant les interactions du système lorsque h est présent, les nœuds de Weyl changent de position. Ce changement de position va donc changer le vecteur effectif \mathbf{b}_{eff} et donc changer le nombre d'isolants de Chern dans la zone de Brillouin. La deuxième interprétation est de remarquer que les interactions augmentent le caractère ferromagnétique de notre système. En effet, par l'intermédiaire de Σ^z , l'aimantation de spin $\langle S^z \rangle = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/2$ augmente, ce qui a un effet direct sur la conductivité de Hall. Ces deux interprétations sont strictement équivalentes. Enfin, il peut être surprenant que le poids des quasi-particules n'ait aucun effet sur σ_{xy} à demi remplissage. C'est ici l'une des conséquences du caractère topologique de la conductivité anormale de Hall puisque la courbure de Berry dépend essentiellement des fonctions d'onde du système. Le poids de quasi-particule n'intervenant que comme une constante multiplicative dans l'Hamiltonien 3.14, les fonctions d'onde du système sont inchangées.

4.2 L'aimantation orbitale

L'aimantation orbitale est un phénomène bien connu en physique du solide. En effet dans les métaux conventionnels, l'aimantation se réduit souvent à deux contributions : une contribution paramagnétique dont l'origine est l'aimantation de spin et que l'on appelle paramagnétisme de Pauli et une contribution diamagnétique dont l'origine est le mouvement orbital d'électrons soumis à un champ magnétique et que l'on appelle diamagnétisme de Landau. Dans le cas de métaux ordinaires avec une énergie de dispersion quadratique, la susceptibilité de Pauli est trois fois plus importante que la susceptibilité de Landau. Cependant, ces susceptibilités dépendent beaucoup des détails microscopiques du matériau [15]. De plus, même si l'aimantation orbitale n'est pas une quantité topologique, elle présente un lien très fort avec certaines quantités topologiques comme la conductivité anormale de Hall [89].

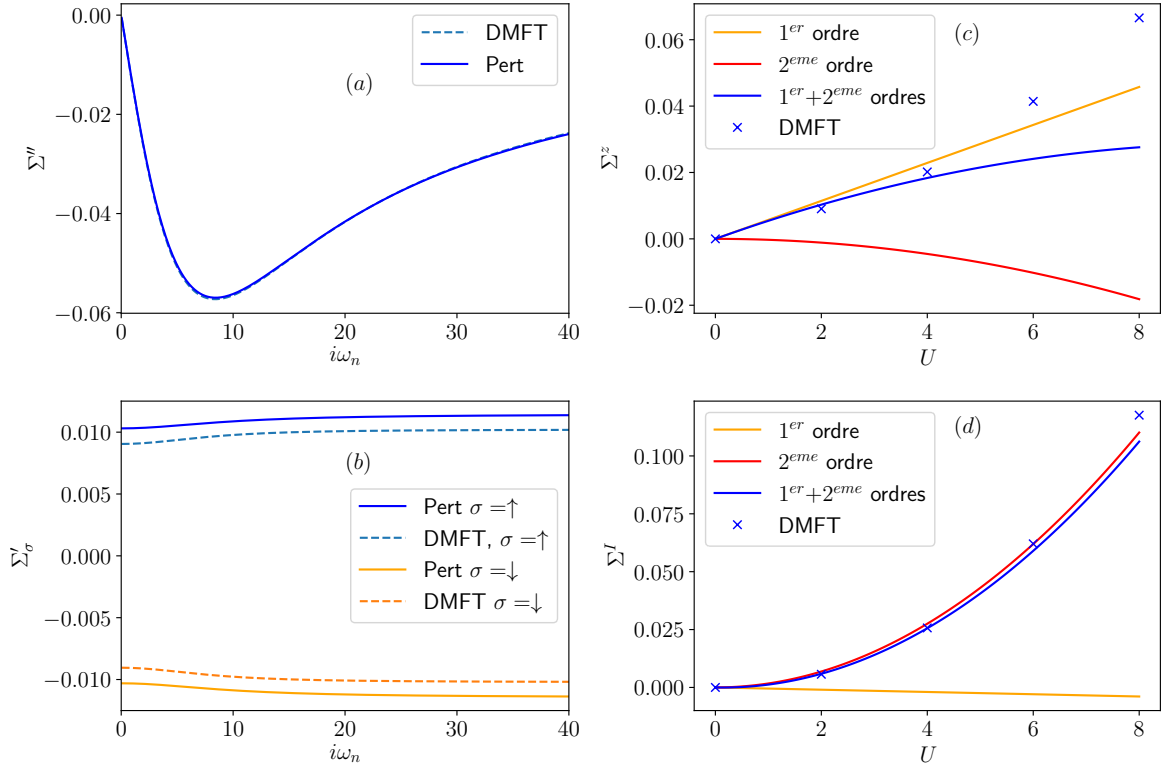


FIGURE 4.4 a) Parties imaginaires de self-énergies pour $U = 2$ et à demi remplissage en fonction des fréquences de Matsubara. La ligne continue représente la self-énergie obtenue grâce à la DMFT avec un solveur d'impureté basé sur la diagonalisation exacte et la ligne discontinue représente la self-énergie obtenue grâce à une approche perturbative à l'ordre deux. Ces parties imaginaires sont identiques pour les deux valeurs de spin. b) Parties réelles des self-énergies pour différents spins à $U = 2$ et à demi rempli en fonction des fréquences de Matsubara. Les self-énergies obtenues grâce à l'approche perturbative semble avoir un décalage constant par rapport à celles obtenues en DMFT. Cela n'a cependant aucun effet sur la partie imaginaire car les relations de Kramers-Krönig sont valables à une constante additive près. c) Σ' pour différents ordre de développement en perturbation comparé aux valeurs DMFT. Les valeurs présentées sont calculées à demi remplissage. d) Σ'' pour différents ordre de développement en perturbation comparé aux valeurs DMFT. Ici, le potentiel chimique est fixé à $\mu = -0.5$.

Le problème d'un réseau infini et périodique comme dans la théorie de Bloch a longtemps été hermétique au calcul de l'aimantation orbitale alors que ce dernier ne pose pas de problème pour des systèmes de taille finie comme les molécules ou les amas [90]. Des théories de réponses linéaires sont connues depuis des décennies mais elles ne permettent de déterminer que le *changement relatif* de l'aimantation orbitale (comprenez la susceptibilité orbitale) et non sa valeur [91, 92, 93]. Il aura fallu attendre 2005 pour qu'une théorie, la *théorie moderne de l'aimantation orbitale*, permette de généraliser les formules de l'aimantation orbitale pour des systèmes de taille finie à des systèmes périodiques [80, 81].

Pour la suite de ce travail, nous utilisons une version généralisée aux interactions de cette théorie

développée par Nourafkan *et al.* [94]. En se basant sur la définition physique de l'aimantation orbitale, c'est-à-dire la dérivée du grand potentiel par rapport au champ magnétique externe, il peut être montré que la composante a de l'aimantation orbitale est :

$$M_{\text{orb}}^a = \left(\frac{ie}{2\hbar} \right) \left(\frac{1}{N\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \epsilon^{abc} \text{Tr} \left\{ \left[\mathbf{H}_0 - \mu \mathbf{I} + \frac{\boldsymbol{\Sigma}}{2} \right] \mathbf{G} \left(-\frac{\partial \mathbf{G}^{-1}}{\partial k_b} \right) \mathbf{G} \left(-\frac{\partial \mathbf{G}^{-1}}{\partial k_c} \right) \mathbf{G} \right\} \\ + \left(\frac{1}{2N\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}, \omega_m} \text{Tr} \left\{ [\mathbf{H}_0 + (i\omega_m - \mu)\mathbf{I}] \mathbf{G} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial B_a} \Big|_{B=0} \mathbf{G} \right\}. \quad (4.22)$$

Les indices a, b et c représentent les coordonnées de l'espace $\{x, y, z\}$ et ϵ^{abc} est le tenseur anti-symétrique de Levi-Civita. On a aussi adopté la convention d'Einstein où l'on somme sur les indices répétés b et c . Cette équation présente un avantage indéniable : dans la limite sans interaction, c'est-à-dire lorsque $\boldsymbol{\Sigma} = 0$, on retrouve la fameuse *théorie moderne de l'aimantation orbitale* (cf. Annexe A de l'article [94]).

Il faut aussi préciser que l'équation 4.22 est dérivée dans la limite où le champ magnétique externe tend vers zéro. Cela n'est pas forcément le cas dans notre réseau puisque le terme h peut être vu comme un terme Zeeman proportionnel au champ magnétique externe. Cependant, nous considérons toujours la limite où h est petit comparé à notre unité d'énergie t . Enfin, rappelons que nous ne nous intéresserons qu'à la composante z de l'aimantation orbitale puisque la séparation et le mouvement des nœuds se fait le long de k_z dans la zone de Brillouin.

4.2.1 Semi-métaux de Weyl sans interaction et formule de Středa

De façon similaire à la conductivité anormale de Hall, l'aimantation orbitale acquiert une valeur non nulle seulement lorsque h est différent de zéro. Pour comprendre cela, regardons l'aimantation orbitale partielle qui correspond aux éléments diagonaux de l'intégrande dans l'équation 4.22. Ces quantités ne sont pas invariantes de jauge et dépendent donc de la base choisie pour représenter l'Hamiltonien mais elles nous renseignent sur l'aimantation orbitale totale. La figure 4.5(a) représente l'aimantation partielle en fonction du potentiel chimique μ pour $h = 0$ et $h = 0.2$. Il est intéressant de remarquer que même lorsque $h = 0$, les aimantations orbitales partielles ne sont pas nulles mais s'annulent parfaitement lorsque qu'on les somme. Lorsque $h \neq 0$, les aimantations orbitales partielles se décalent dans des directions opposées. C'est ce décalage des aimantations orbitales partielles qui entraîne l'apparition d'une aimantation orbitale non nulle. Comme ce glissement se fait de façon symétrique par rapport à $\mu = 0$, l'aimantation orbitale reste nulle à demi remplissage.

On peut aussi expliquer le fait que l'aimantation orbitale reste nulle à $\mu = 0$ par des arguments de symétries. En effet, malgré la présence d'un terme Zeeman non nul qui brise les symétries miroirs vues dans la section 3.1.1, une symétrie particule-trou reste présente dans le système. Or, l'aimantation orbitale est une quantité sensible à ce genre de symétries notamment par le biais du vertex énergie (voire l'équation 4.24). Ainsi, si les brisures des symétries 3.7 et 3.8 entraînent ce glissement des aimantations orbitales partielles, la présence d'une symétrie particule-trou malgré l'ajout de h

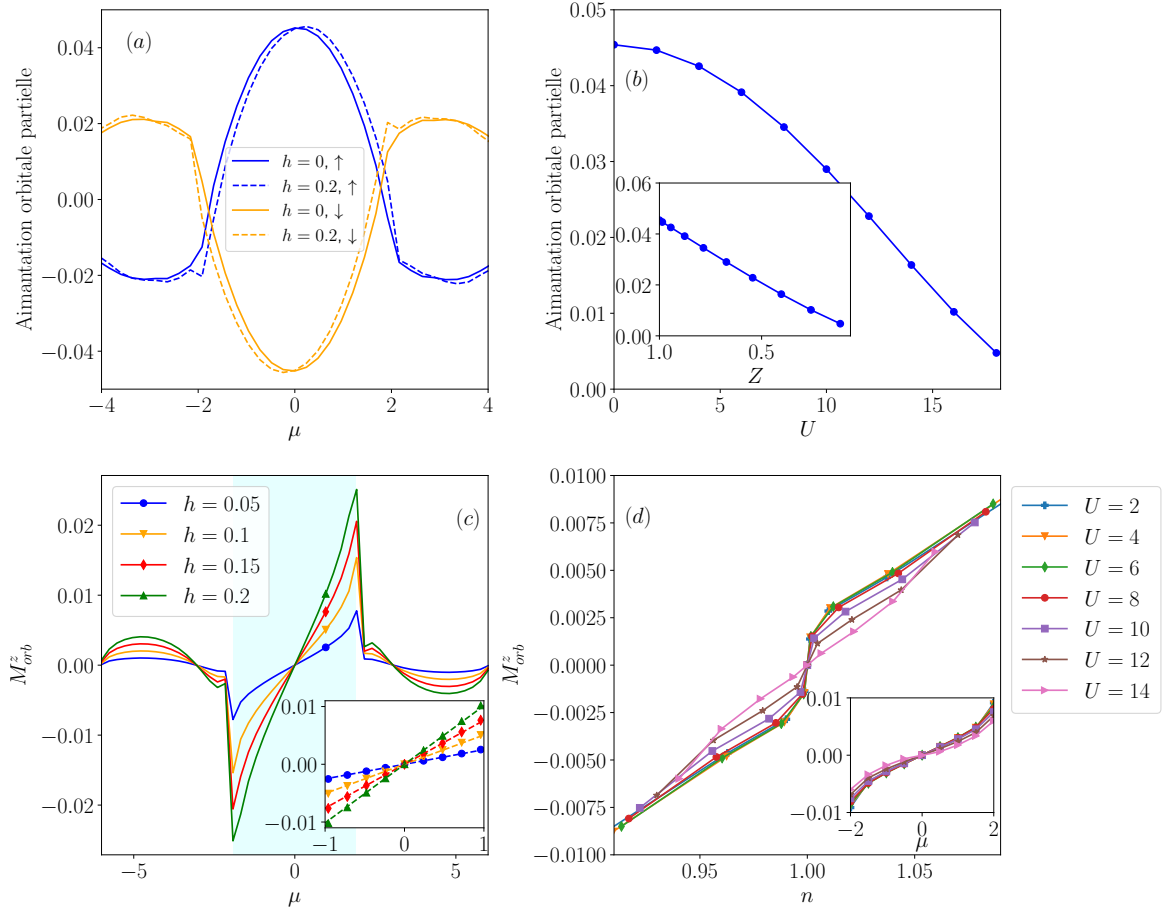


FIGURE 4.5 a) Aimantation orbitale partielle sans interaction en fonction du potentiel chimique pour $h = 0$ (ligne continue) et $h = 0.2$ (ligne discontinue). Les symboles \uparrow et \downarrow différencient les orbitales. Notez que cette aimantation orbitale partielle dépend de la base choisie pour l'Hamiltonien. b) Valeur de l'aimantation orbitale partielle à $\mu = 0$ pour la bande \uparrow en fonction du terme d'Hubbard U pour $h = 0.05$. L'interaction renormalise l'aimantation orbitale partielle par l'intermédiaire du poids de quasi-particule Z comme le panneau dans la figure le montre. Dans ce dernier, on a tracé l'aimantation orbitale en fonction du poids de quasi-particule. c) Aimantation orbitale sans interaction en fonction du potentiel chimique pour différentes valeurs de h . Deux régions sont présentes : la région où le fond est bleu cyan et qui délimite la région où les bandes électroniques sont essentiellement linéaires et la région où le fond est blanc où les bandes ont un comportement quadratique. Le panneau est un agrandissement de la même figure dans le régime linéaire. Les symboles représentent les valeurs numériques calculées à partir de l'équation 4.6 et les lignes pointillées sont les fonctions $-\mu \times \sigma_{xy}$ avec σ_{xy} calculées à partir de 4.18. d) Aimantation orbitale en présence d'interaction en fonction de la densité électronique pour $h = 0.05$. Autour du demi-remplissage, l'aimantation orbitale semble être une fonction multivaluée dans le sens où l'aimantation prend plusieurs valeurs distinctes pour une densité électronique donnée. Ce comportement est dû à une certaine incertitude sur la densité électronique du réseau en interaction dans nos simulations.

prévient le fait que l'aimantation orbitale acquiert une valeur non nulle à demi-remplissage.

Dans un isolant topologique sans interaction, l'aimantation orbitale est proportionnelle au nombre de Chern tant que le potentiel chimique est dans le gap isolant [94]. Notre modèle exhibe une physique similaire tant que le potentiel chimique se trouve dans une région où les bandes électroniques sont linéaires. La figure 4.5(c) représente l'aimantation orbitale totale pour différentes valeurs de h en fonction du potentiel chimique μ . On remarque que l'aimantation orbitale est essentiellement linéaire dans la région délimitée par le fond bleu cyan. Cette dernière correspond précisément à la région où les bandes électroniques sont linéaires et où la surface de Fermi est composée de poches déconnectées. Mieux encore, comme la contribution intrinsèque de la conductivité anormale de Hall est aussi proportionnelle aux nombres de Chern, l'aimantation orbitale peut être vue comme directement proportionnelle à cette dernière :

$$M_{\text{orb}}^z = -\mu\sigma_{xy}. \quad (4.23)$$

Pour comprendre cette équation, il faut savoir qu'en absence d'interactions, la conductivité anormale de Hall est égale à des constantes (fondamentales) multiplicatives près, à la dérivée de l'aimantation orbitale par rapport au potentiel chimique, c'est la formule de Štředa [89]. Comme cette conductivité se réduit à sa valeur topologique (voir Figure 4.2) et qu'elle ne dépend pas du potentiel chimique dans la région bleu cyan, on obtient naturellement l'équation 4.23. Le panneau dans la figure 4.5(c) représente un agrandissement de l'aimantation orbitale autour de $\mu = 0$. La linéarité de l'aimantation orbitale ne fait pas de doute et on peut vérifier la formule de Štředa puisque les lignes en pointillées reliant les points dans le panneau de la formule 4.5 correspondent aux fonctions $-\mu\sigma_{xy}$, c'est-à-dire le potentiel chimique multiplié par la conductivité anormale de Hall obtenue grâce à l'équation 4.18.

Physiquement, l'équation 4.23 peut être expliquée à l'aide des isolants de Chern bidimensionnels entre les nœuds de Weyl. En effet, en deux dimensions, un isolant de Chern possède un courant chiral non dissipatif sur ses côtés qui contribue à l'aimantation orbitale [81]. Cette contribution est prise en compte dans la formule 4.22 malgré le fait que cette dernière soit une équation de volume seulement. Ainsi, cette explication lie directement la conductivité anormale de Hall et l'aimantation orbitale en soulignant leur origine commune : la présence d'isolants de Chern bidimensionnels entre deux nœuds de Weyl de chiralité opposée.

4.2.2 Effet des interactions et modification de la formule de Štředa

Pour calculer l'aimantation orbitale dans un système interagissant, on utilise l'équation 4.22 à laquelle on applique une série d'approximations. Comme dans l'équation 4.3, on ne considère aucune correction de vertex. De plus, le second terme de l'équation 4.22 s'annule dans le paradigme de la DMFT. En effet, le caractère purement local de la self-énergie fait que cette dernière ne peut pas dépendre linéairement du champ magnétique d'où le fait que $\partial\Sigma/\partial B_a = 0$. Cela fait aussi écho à l'étude où l'effet orbital est pris en compte exactement dans le paradigme de la DMFT [95]. Ainsi, la

formule de l'aimantation orbitale utilisée dans la suite est :

$$M_{\text{orb}}^z = \left(\frac{ie}{2\hbar} \right) \left(\frac{1}{N\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \epsilon^{zbc} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\left[\mathbf{H}_0 - \mu \mathbf{I} + \frac{\Sigma}{2} \right]}_{\text{vertex énergie}} \mathbf{G} \left(-\frac{\partial \mathbf{G}^{-1}}{\partial k_b} \right) \mathbf{G} \left(-\frac{\partial \mathbf{G}^{-1}}{\partial k_c} \right) \mathbf{G} \right\}. \quad (4.24)$$

Permettons-nous un petit aparté sur la prise en compte des interactions à l'aide de la formule 4.24 car il existe une subtilité. En effet, la définition de l'énergie potentielle impose le facteur $1/2$ sur la self-énergie dans le vertex énergie. Ce facteur est intimement lié à la définition de la self-énergie [48] et est donc présent sous une forme ou sous une autre quelque soit nos définitions de départ. Lorsque l'on fait le choix de la traditionnelle forme d'Hamiltonien $U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow}$, la différence $\mu - \Sigma'(i\omega_n)/2$ dans le vertex énergie ne s'annule pas à demi-remplissage. En effet, dans ce cas particulier, la symétrie particule-trou impose que le potentiel chimique et la partie Hartree-Fock de la self-énergie soient égaux à $U/2$. Lorsqu'un effet Hall anormal est présent, ce choix entraînera une aimantation orbitale non nulle. Pourtant, le choix de la forme de l'Hamiltonien d'interaction ne doit pas changer le comportement d'observables physiques. Pour comprendre notre erreur, rappelons-nous que l'aimantation orbitale, du fait de la présence du vertex énergie, est sensible au choix de l'origine des énergies. Dans le cas de l'Hamiltonien $U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow}$, l'origine des énergies est déplacée avec U alors que dans le cas de l'Hamiltonien d'interaction présent dans l'équation 3.5, l'origine est fixée au demi-remplissage avec ou sans interaction électronique. Derrière ce choix d'origine se cache la prise en compte des énergies dues aux atomes dans notre système et cela n'a donc rien à voir avec le choix d'une interaction purement locale. On pourra utiliser cet argument dans le modèle du jellium [82] où l'énergie des ions doit être prise en compte pour compenser la contribution Hartree de l'interaction longue portée.

L'aimantation orbitale n'étant pas à proprement parler une quantité topologique, elle devrait voir sa valeur diminuée à cause du poids spectral. Cela se remarque simplement en comparant les intégrandes des expressions 4.6 et 4.24. Le vertex de fréquences (comprenez la dérivée par rapport aux fréquences de Matsubara de la fonction de Green) présent dans la première expression est absent dans la seconde. Or, en utilisant la fonction de Green des quasi-particules équation 4.19 pour évaluer le vertex de fréquences, on remarque que ce dernier introduit un terme en Z^{-1} qui va jouer un rôle très important dans l'absence de dépendance en poids spectral de la conductivité anormale de Hall. Son absence dans la formule de l'aimantation orbitale entraîne donc une dépendance en Z . La figure 4.5(b) représente la dépendance en U de l'aimantation orbitale partielle positive à $\mu = 0$. On remarque que cette dernière diminue lorsque U augmente. Mieux, le panneau dans la même figure représente la dépendance en Z de la même quantité.

D'un autre côté, nous avons vu dans la section 4.1 que l'interaction d'Hubbard augmente le terme Zeeman effectif et par la même occasion la conductivité anormale de Hall. Le lien entre cette dernière et l'aimantation orbitale laisse penser que les interactions introduisent deux mécanismes aux effets contraires. La figure 4.5(d) illustre parfaitement ces effets antagonistes. L'aimantation orbitale est tracée en fonction de la densité électronique pour différentes valeurs de U . Dans le régime de faible interaction, l'aimantation est très peu affectée par les interactions. Ce n'est que lorsque U

est du même ordre de grandeur que la largeur de bande $W = 12$, que l'on observe un changement radical du comportement de l'aimantation. Lorsque l'on trace l'aimantation orbitale en fonction du potentiel chimique comme cela est fait dans le panneau de la figure 4.5(d), on remarque que le régime où l'aimantation est peu dépendante de U correspond au régime où elle est linéaire en μ avec une pente elle-même peu dépendante de l'interaction d'Hubbard.

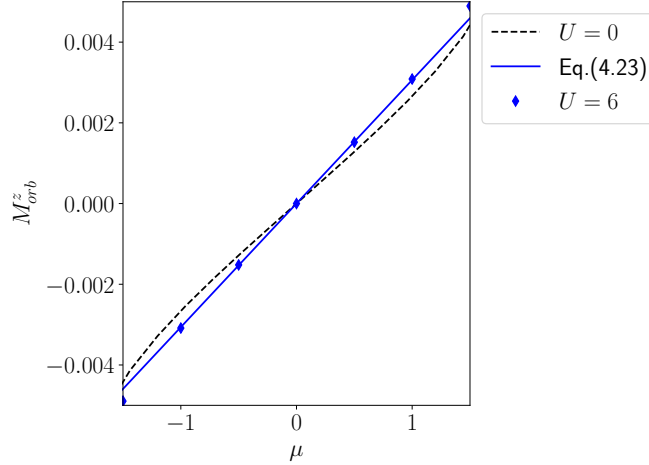


FIGURE 4.6 Aimantation orbitale en fonction du potentiel chimique pour $U = 0$ (ligne en pointillée) et $U = 6$ (losanges bleus). La ligne continue bleue correspond à la formule de Středa généralisée vue dans l'équation 4.25 dans laquelle on a utilisé la self-énergie issue de la théorie des perturbations et une différence finie pour obtenir la dérivée par rapport au potentiel chimique. Pour les deux valeurs de U , un terme Zeeman de départ égale à $h = 0.05$ a été utilisé.

Il apparaît donc que ces deux effets contraires se compensent à-peu-près lorsque les corrélations électroniques sont faibles. La linéarité de l'aimantation orbitale en fonction du potentiel chimique vue précédemment indique qu'une généralisation de la formule de Středa 4.23 devrait être possible. En fait, une approche mixte mêlant une approche de quasi-particules et un traitement approprié des self-énergies permet de généraliser l'équation 4.23 dans le cas avec interaction :

$$M_{\text{orb}}^z = -\mu Z^2 \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\partial \Sigma^I}{\partial \mu} \right) \sigma_{xy}^{QP}. \quad (4.25)$$

Cette formule fonctionne extrêmement bien dans le régime des faibles et moyennes corrélations et met en avant l'importance de la composante Σ^I dans l'aimantation orbitale alors qu'elle était absente dans l'étude de la conductivité anormale de Hall. Pour illustrer nos propos, on a tracé dans la figure 4.6 l'aimantation orbitale en fonction du potentiel chimique pour les cas $U = 0$ et $U = 6$ avec $h = 0.05$. La ligne continue bleue est la fonction 4.25 où on a obtenu la dérivée de Σ^I à partir d'une différence finie sur la self-énergie issue de la théorie des perturbation. On remarque que l'accord entre le calcul exact et la généralisation de la formule de Středa est extrêmement bon. Cette figure permet aussi de montrer l'effet faible mais présent des interactions sur l'aimantation orbitale.

Passé le régime des corrélations intermédiaires, l'aimantation orbitale tend vers zéro. Dans cette compétition entre les deux effets antagonistes, c'est le poids des quasi-particules qui gagne à la fin. Cela n'est guère surprenant puisque l'aimantation orbitale vient du mouvement orbital des électrons, or, ces derniers sont de plus en plus localisés à mesure que l'on se rapproche de la transition de Mott entraînant ainsi une diminution de l'aimantation orbitale.

4.3 Résumé

Dans les semi-métaux de Weyl ferromagnétiques, l'existence d'un effet Hall anormal est dû à la topologie non triviale des nœuds de Weyl. Ces derniers peuvent être vus comme des *sources* de courbure de Berry. Comme les nœuds viennent par paire de chiralité opposée, il existe une région dans la zone de Brillouin correspondant à un empilement d'isolants de Chern bidimensionnel qui contribuent à la conductivité anormale de Hall.

De plus, si la conductivité anormale de Hall se réduit exactement à sa valeur topologique lorsque le potentiel chimique se trouve au niveau des nœuds de Weyl, elle reste quasiment constante lorsque l'on dope un semi-métal de Weyl ferromagnétique. Plus précisément, la conductivité Hall reste égale à sa valeur intrinsèque tant que le potentiel chimique se trouve dans la région où les bandes électroniques sont linéaires et que la surface de Fermi n'est pas très importante. Ce dernier critère se traduit par une petite valeur de densité locale d'états au niveau de Fermi. Les interactions modifient les positions des nœuds de Weyl dans la zone de Brillouin. Cela influence directement le "nombre" d'isolants de Chern entre les nœuds et donc la conductivité anormale de Hall. De plus, la protection topologique des contributions des isolants de Chern fait que le poids des quasi-particules n'a aucun effet sur la contribution topologique de l'effet Hall anormal. Combinés ensemble, le mouvement des nœuds de Weyl et la protection topologique entraînent, *in fine*, une augmentation en valeur absolue de la conductivité anormale de Hall dans les semi-métaux de Weyl en présence d'interaction de Hubbard.

L'aimantation orbitale suit un comportement intimement lié à la conductivité anormale de Hall. Dans les semi-métaux ferromagnétiques, on peut relier l'aimantation orbitale à la conductivité de Hall grâce à la formule de Středa, la première étant égale à la seconde multipliée par le potentiel chimique. Dans les semi-métaux de Weyl ferromagnétiques, cette relation vient précisément du fameux empilement d'isolants de Chern entre les nœuds qui contribuent aux deux quantités par l'intermédiaire d'un courant chiral sur leurs bords.

L'ajout d'interaction dans le système entraîne deux effets antagonistes sur l'aimantation orbitale. D'un côté, cette dernière n'est pas protégée topologiquement. Elle sera donc sensible au poids des quasi-particules qui diminue sa valeur. Physiquement, on comprend que la localisation des électrons du fait des interactions aura un impact négatif sur une quantité dont l'origine est précisément le mouvement orbital des électrons. D'un autre côté, les interactions ont comme effet d'augmenter l'effet Hall anormal et devrait avoir un effet similaire du fait de la relation de Středa.

Finalement, la présence de ces mécanismes entraîne deux régimes distincts dans l'aimantation orbitale : lorsque les corrélations sont faibles, l'aimantation n'est quasiment pas affectée par les interactions, les deux effets antagonistes s'annulant approximativement lorsque l'on regarde l'aimantation orbitale en fonction de la densité électronique. Lorsque les corrélations sont suffisamment importantes, l'effet du poids des quasi-particules domine sur l'augmentation de la conductivité et l'aimantation orbitale diminue à mesure que l'on s'approche de la transition de Mott.

Chapitre 5

La théorie du champ moyen dynamique en présence d'un champ magnétique externe et uniforme

Les travaux présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'un article [95].

Introduction :

L'effet orbital dû à un champ magnétique externe, statique et uniforme sur un gaz d'électrons libres fait partie des exercices *classiques* en physique quantique. En effet, les approches semi-classique ou purement quantique permettent à eux deux d'expliquer un nombre important de résultats expérimentaux : l'effet Faraday, les effets Hall classique et quantique, le comportement de la magnéto-résistivité ou encore les oscillations quantiques avec les effets de Haas-Van Alphen et Shubnikov-de Haas [96]. Ces succès sont d'autant plus impressionnants que les concepts mathématiques et physiques derrière ces approches sont relativement accessibles. Le cas d'école de transformer l'équation de Schrödinger d'un gaz d'électron bidimensionnel soumis à un champ magnétique externe et uniforme en l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique s'enseigne dans les premières années de formation à la mécanique quantique et suffit déjà à expliquer une bonne partie des expériences.

On pourrait se laisser tenter de faire l'impasse sur les effets combinés d'un champ magnétique externe et d'un réseau cristallin sur les électrons. En effet, les expériences sur des matériaux réels semblaient indiquer qu'il n'y pas de réels effets combinés et bien souvent la simple renormalisation des observables physiques, comme la masse des électrons par exemple, suffit à expliquer les expériences (cf. la théorie de Lifschitz-Kojevitch [97]). Pourtant, cette impasse cache une riche physique dont la compréhension théorique a commencé avec les balbutiements de la physique topologique et dont

les vérifications expérimentales sont maintenant permises grâce à l'accessibilité de laboratoires de champs magnétiques intenses et à la maturité des expériences d'atomes froids.

Dans ce chapitre, la section 5.1 aborde les principaux changements qu'entraîne la présence d'un réseau cristallin couplé à un champ magnétique. Ces changements tels que la brisure de l'invariance par translation et l'émergence d'une cellule unité magnétique devraient rendre l'application de la DMFT caduque dans ces systèmes. La section 5.2 démontre que les équations de la DMFT restent néanmoins inchangées. Enfin, la section 5.3 présente des résultats obtenus en utilisant la DMFT dans un réseau carré avec une interaction de type Hubbard et soumis à un champ magnétique constant.

5.1 Comment prendre en compte l'effet orbital dû à un champ magnétique externe et uniforme dans un réseau ?

5.1.1 La brisure de l'invariance par translation dans un réseau soumis à un champ magnétique

Commençons par le cas d'un électron dans un potentiel cristallin périodique bidimensionnel V soumis à un champ magnétique externe \mathbf{B} dont la direction est perpendiculaire au plan cristallin. L'équation de Schrödinger stationnaire de ce problème s'écrit :

$$\hat{H}|\psi\rangle = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2 + V(\hat{x}, \hat{y}) \right] |\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle, \quad (5.1)$$

où \mathbf{A} est le potentiel vecteur associé au champ magnétique. En l'absence de \mathbf{A} , on reconnaît sans grande difficulté le formalisme de la théorie de Bloch. Ainsi, si le potentiel cristallin V est invariant par translation le long des deux directions x et y , $V(x+a, y) = V(x, y+b) = V(x, y)$, on peut définir les vecteurs de Bravais $\mathbf{R} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b}$ où n et m sont des entiers et un opérateur translation $\hat{T}_{\mathbf{R}}$. Ce dernier laisse invariant l'Hamiltonien en l'absence de champ magnétique mais comme le potentiel vecteur n'est pas forcément invariant sous les mêmes translations du réseau, on se retrouve avec une brisure de l'invariance par translation du réseau.

5.1.2 Définition d'un opérateur de translation magnétique et d'une zone de Brillouin magnétique

Il est possible de contourner légèrement ce problème en définissant un nouvel opérateur de translation que l'on appellera *opérateur de translation magnétique* :

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{R}} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{r}} \wedge \frac{\mathbf{B}}{2} \right) \right] = \hat{T}_{\mathbf{R}} \exp \left[\frac{ie}{\hbar} \left(\mathbf{B} \wedge \hat{\mathbf{R}} \right) \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{2} \right]. \quad (5.2)$$

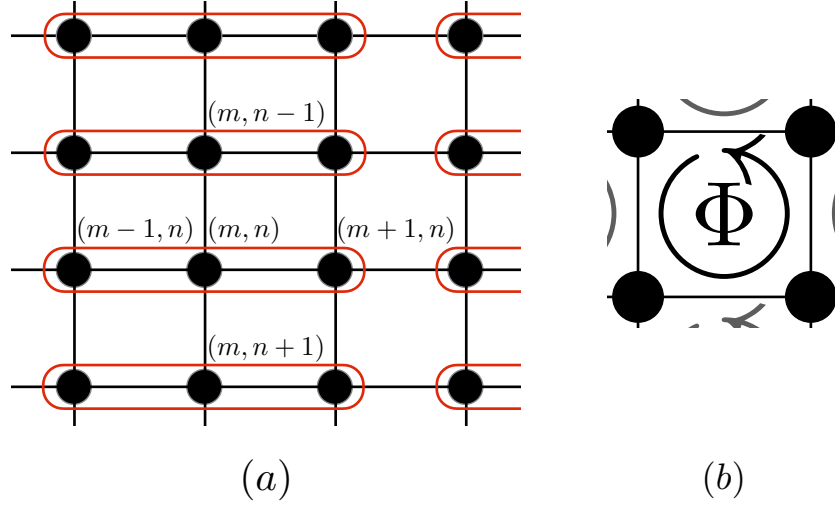


FIGURE 5.1 a) Schéma du réseau avec une cellule unité magnétique pour $q = 3$. La numérotation choisie pour indexer les sites est la même que pour l'équation 5.5. b) Schéma de la plaquette traversée par le flux magnétique Φ .

Cet opérateur laisse invariant l'Hamiltonien 5.1 lorsque l'on choisit la jauge symétrique pour exprimer le potentiel vecteur $\mathbf{A} = \mathbf{B} \wedge \mathbf{r}/2$. On pourrait alors penser que le travail du théoricien est terminé et qu'il suffit maintenant de trouver une base de vecteurs qui diagonalise simultanément l'opérateur de translation magnétique et l'Hamiltonien sous champ magnétique. Cependant, il est facile de montrer que de façon générale les opérateurs de translation magnétique $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ et $\hat{T}_{\mathbf{b}}$ ne commutent pas entre eux, nous poussant à redéfinir les vecteurs \mathbf{a} et \mathbf{b} .

Une façon de le faire est de définir le ratio $n_{\Phi} = \Phi/\Phi_0 = p/q$ (p et q étant deux entiers premiers entre eux) où Φ est le flux magnétique à travers une plaquette (dans le cas d'un réseau rectangulaire, $\Phi = B a b$ où B l'amplitude du champ magnétique). Cela est illustré dans la figure 5.1(b)) et $\Phi_0 = h/e$ le quanta de flux magnétique. Cela nous permet de définir simplement nos nouveaux vecteurs de Bravais : $\tilde{\mathbf{R}} = n(q\mathbf{a}) + m\mathbf{b}$. Ces derniers permettent de définir une nouvelle cellule unité du réseau que l'on appelle *cellule unité magnétique*. Une des conséquences de cette nouvelle périodicité dans notre système est l'apparition d'une nouvelle zone de Brillouin plus réduite que l'originale et que l'on appelle *zone de Brillouin magnétique*.

Le rapport p/q peut laisser penser qu'il s'agit d'une pure astuce mathématique et que cela ne permet pas d'expliquer les champs magnétiques réels. À cela, on pourrait répondre (encore une fois mathématiquement) que \mathbb{Q} est dense dans \mathbb{R} , c'est-à-dire que l'on peut approximer avec la précision que l'on souhaite n'importe quel n_{Φ} réel comme le rapport de deux entiers. De plus, on arrive à retrouver les niveaux de Landau auxquels nous sommes habitués lorsque l'énergie de dispersion des électrons de Bloch est quadratique (cf. Annexe D), ce qui permet d'avoir confiance dans le formalisme que l'on utilise.

5.1.3 Énergies propres des électrons de Bloch soumis à un champ magnétique

Dans la sous-section précédente, nous avons suivi le cheminement de Kohmoto dans un article publié en 1985 [98]. Cependant, le fait d'imposer le rapport des flux magnétiques n_Φ comme étant égal à un rapport de deux entiers avait été rendu célèbre une décennie plus tôt par Douglas Hofstadter dans son célèbre article de 1976 [99]. Dans ce papier, Hofstadter avait obtenu numériquement les énergies propres ainsi que les fonctions d'onde d'un réseau carré soumis à un champ magnétique uniforme et dont le rapport n_Φ est égal à celui de deux entiers, ce qui lui aura permis de découvrir ce que l'on appelle aujourd'hui le papillon d'Hofstadter. Cette figure géométrique correspondant aux énergies propres du système en fonction du rapport de flux magnétique n_Φ est représentée dans la figure 5.2. Elle exhibe un grand nombre de particularités topologiques dont la plus visible est une structure fractale.

Pour obtenir le papillon d'Hofstadter, on prend en compte le champ magnétique grâce à une substitution de Peierls qui modifie les termes de saut :

$$t_{mn} \longrightarrow t_{mn} e^{i f_{mn}}, \quad (5.3)$$

avec la phase de Peierls :

$$f_{mn} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{\mathbf{r}_m}^{\mathbf{r}_n} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l}. \quad (5.4)$$

Pour la suite de la dérivation, nous adoptons la jauge de Landau $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$. L'équation de Schrödinger stationnaire se ramène alors à une équation matricielle du type $H|m, n\rangle = \epsilon|m, n\rangle$ où les indices m et n permettent de numérotter les sites du réseau par rapport à une origine arbitraire (cf. figure 5.1(a)). En utilisant l'invariance par translation le long de la direction y , $\psi_{m,n} = \exp(i\nu na)\psi_m$, on obtient la matrice de Harper :

$$\psi_{m+a} + \psi_{m-a} + 2 \cos(2m\pi n_\Phi - \nu a) \psi_m = \frac{\epsilon}{t} \psi_m. \quad (5.5)$$

On peut voir m comme un indice de site dans la cellule unité magnétique, a est le pas du réseau (que l'on fixe à 1) et ν est le moment le long de la direction y . Pour obtenir le papillon d'Hofstadter, il faut maintenant utiliser l'invariance par translation de la cellule unité magnétique.

Malgré une prédiction théorique vieille de plus de 40 ans, le papillon n'a été vu expérimentalement que très récemment [100]. Cela vient du fait qu'il n'apparaît que pour des rapports p/q suffisamment grands, c'est-à-dire, lorsque q est de l'ordre de l'unité. Cette condition nous impose des champs magnétiques phénoménaux (de l'ordre de 10^5 Tesla) qui sont irréalisables aujourd'hui et qui, de toute manière, détruiront l'échantillon bien avant de pouvoir effectuer les mesures. Heureusement pour nous, nous nous intéressons aux niveaux de Landau qui apparaissent lorsque q est suffisamment petit (de l'ordre de la dizaine voire de la centaine). Quand q respecte cette condition, on retrouve une physique que nous qualifierons de régime de Landau. Ce régime est caractérisé par des énergies propres :

- bien définies et espacées entre elles par une fonction du champ magnétique,

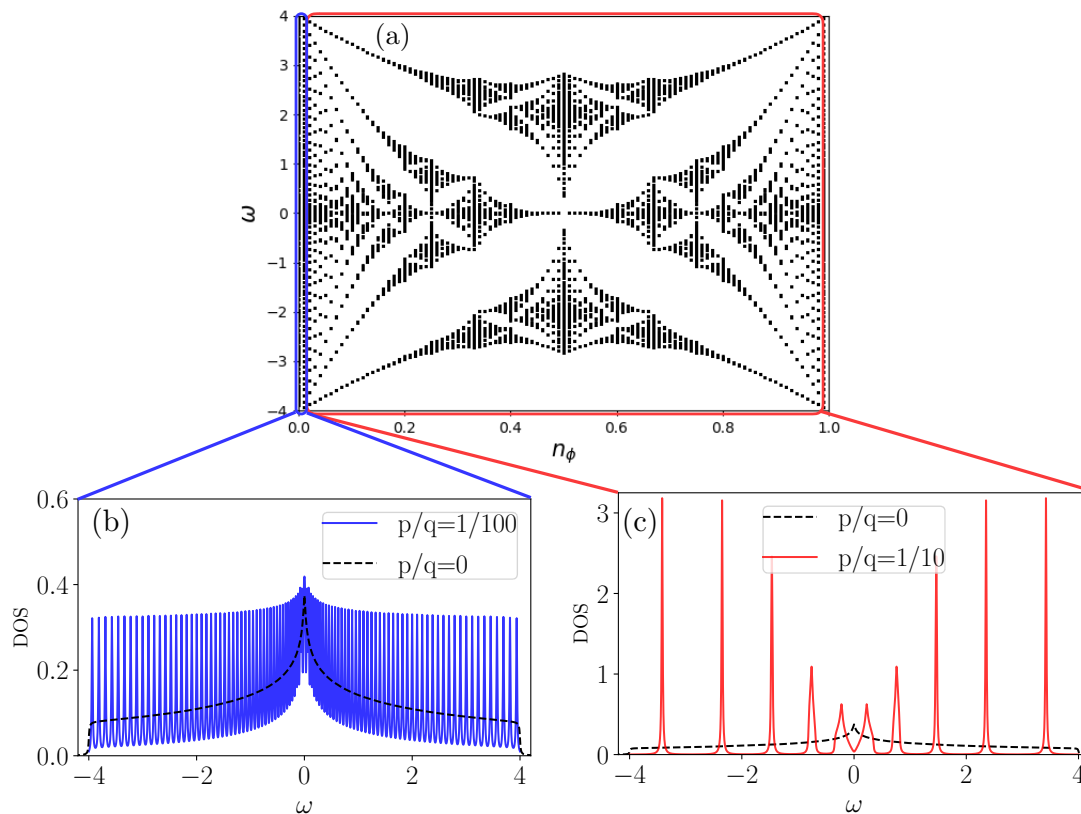


FIGURE 5.2 a) Papillon d'Hofstadter. Cette figure représente les énergies propres d'un réseau carré soumis à un champ magnétique externe en fonction du rapport des flux magnétiques n_ϕ . On y remarque certaines caractéristiques telles que la présence de gaps qui forment notamment les ailes du papillon et une structure fractale. b) Densités d'états locales du réseau carré dans le régime de Landau. En ligne discontinue noire, la densité d'états sans champ magnétique et en ligne continue bleue, la même densité d'états pour un rapport de flux magnétique $n_\phi = 1/100$. c) Densité d'états locale dans le régime d'Hofstadter. La densité d'états représentée par une ligne continue rouge est celle obtenue pour un rapport de flux $p/q = 1/10$. Elle est à comparer avec la densité d'états en l'absence de champ magnétique (ligne discontinue noire). On remarque que les deux densités d'états n'ont plus grand-chose à voir entre elles. Comme q est pair, le système exhibe une phase semi-métallique qui se caractérise par une densité d'états linéaire autour de $\omega = 0$, comportement typique des semi-métaux bidimensionnels.

- indépendante du moment ν .

Ce régime est illustré dans la figure 5.2. On peut lui opposer le régime d'Hofstadter qui apparaît lorsque le rapport n_ϕ devient suffisamment grand et dans lequel les énergies propres du système dépendent fortement de ν et où certaines propriétés apparaissent comme la nature métallique ou semi-métallique du système en fonction de la parité de q [101].

5.2 Dérivation des équations de la DMFT en présence d'un champ magnétique externe et uniforme

La sous-section précédente nous a permis d'introduire les principaux effets qu'entraîne la présence d'un champ magnétique sur un réseau. Il est tentant de se dire que la définition d'une cellule unité magnétique sauve la DMFT puisqu'il est possible de résoudre le problème d'impureté sur chacun des q sites de la cellule unité magnétique. Cela est notamment envisageable dans le paradigme de la théorie du champ moyen dans l'espace réel (RDMFT) [102] où la self-énergie est prise locale mais dépendante de la position du site du réseau. Dans le régime d'Hofstadter, l'implémentation de la RDMFT ne pose pas vraiment de problèmes puisque q peut-être pris relativement petit (de l'ordre de l'unité) [103]. L'étude du régime de Landau pose quant à lui un bémol pratique puisque q peut-être phénoménalement grand. Dans cette section, nous allons dériver les équations de la DMFT lorsque le système étudié est soumis à un champ magnétique uniforme. Cette dérivation, aussi disponible dans la thèse de L-F. Arsenault [69] a été légèrement modifiée pour ne plus avoir besoin de l'hypothèse de termes de sauts réels.

5.2.1 Fonction de Green invariante par translation et équation du mouvement

L'Hamiltonien de départ pour l'ensemble de la dérivation est :

$$\hat{H} = - \sum_{mn\sigma} t_{mn} e^{if_{mn}} \hat{c}_{m\sigma}^\dagger \hat{c}_{n\sigma} + U \sum_m \hat{n}_{m\uparrow} \hat{n}_{m\downarrow} - \mu \sum_{m\sigma} \hat{n}_{m\sigma}. \quad (5.6)$$

Pour la suite du chapitre, on notera $\tilde{t}_{mn} = t_{mn} e^{if_{mn}}$. On reconnaît la prise en compte de l'effet orbital grâce à la substitution de Peierls vue équation 5.3. À partir de \hat{H} , même en l'absence d'invariance par translation dans le système, il est possible de définir une fonction de Green \bar{G} invariante par translation [104, 105] de la façon suivante :

$$G_{mn}(i\omega_n) = e^{if_{mn}} \bar{G}_{mn}(i\omega_n). \quad (5.7)$$

Malgré l'invariance par translation, la fonction de Green \bar{G} dépend du champ magnétique \mathbf{B} . De plus, son existence et même l'invariance de la fonction de Green locale G_{mm} qui en découle n'indiquent rien sur la validité de la DMFT car la dérivation de cette dernière repose sur G_{mn} et non \bar{G}_{mn} .

On peut aussi définir une self-énergie invariante par translation et dépendante du champ magnétique avec une équation semblable à l'équation 5.7 : $\Sigma_{mn} = \exp(if_{mn}) \bar{\Sigma}_{mn}$ [106] qui implique que la self-énergie locale Σ_{mm} ne dépend pas de la position du site. Physiquement, on comprend aisément que lorsqu'un électron se trouve localisé sur un site, il ressent le même environnement, quelle que soit la position de ce site dans le réseau puisque le champ magnétique est pris uniforme. Ce n'est que lorsqu'il quitte le site que l'électron sera soumis à un environnement qui dépendra de la direction de son saut (grâce à la substitution de Peierls).

On peut dériver les équations de Dyson et les équations du mouvement des fonctions de Green avec champ magnétique dans le paradigme d'une self-énergie locale et indépendante du site du réseau. L'équation de Dyson pour la fonction de Green non invariante par translation peut donc s'écrire :

$$G_{mn}(i\omega_n) = G_{mn}^0(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n) \sum_l G_{ml}^0(i\omega_n) G_{ln}(i\omega_n), \quad (5.8)$$

$$\mathbf{G}(i\omega_n) = \mathbf{G}^0(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n) \mathbf{G}^0(i\omega_n) \mathbf{G}(i\omega_n). \quad (5.9)$$

La même convention que pour le chapitre 2 a été prise pour différencier les fonctions de Green non interagissantes \mathbf{G}^0 et interagissantes \mathbf{G} .

On peut aussi définir les équations du mouvement de la fonction de Green non interagissante :

$$(i\omega_n + \mu) G_{mn}^0(i\omega_n) = \delta_{mn} - \sum_l \tilde{t}_{ml} G_{ln}^0(i\omega_n), \quad (5.10)$$

soit, en écriture matricielle :

$$(i\omega_n + \mu) \mathbf{G}^0(i\omega_n) = \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{t}} \mathbf{G}^0(i\omega_n) \quad (5.11)$$

$$\mathbf{G}^0(i\omega_n) = ((i\omega_n + \mu) \mathbf{I} + \tilde{\mathbf{t}})^{-1}. \quad (5.12)$$

En définissant $\tilde{z} = i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)$ et en utilisant l'équation de Dyson 5.8, les équations du mouvement pour les fonctions de Green peuvent donc se réécrire comme suit :

$$\tilde{z} G_{ij}(i\omega_n) = \delta_{ij} - \sum_k \tilde{t}_{ik} G_{kj} = \delta_{ij} - \sum_k G_{ik} \tilde{t}_{kj}. \quad (5.13)$$

où on a utilisé la même astuce algébrique que dans l'équation 2.36 pour le terme de droite. Comme dans le cas sans champ magnétique, on peut se ramener à une équation qui lie les fonctions de Green interagissante et non-interagissante :

$$\mathbf{G}(i\omega_n) = \mathbf{G}^0[i\omega_n - \Sigma(i\omega_n)], \quad (5.14)$$

Cette sous-section nous a permis d'introduire plusieurs outils mathématiques qui nous seront utiles dans la sous-section suivante : les self-énergies et fonctions de Green locales ne dépendent pas du site sur lequel elles sont projetées. De plus, même en l'absence d'invariance par translation, on peut définir les équations du mouvement pour les fonctions de Green non interagissantes et interagissantes et lier ces dernières entre elles.

5.2.2 Les équations de la théorie du champ moyen dynamique en présence d'un champ magnétique externe et uniforme

Dérivons les équations de la DMFT pour un système soumis à un champ magnétique en utilisant la méthode de la cavité comme dans la section 2.3. Nous passerons les premières étapes, car elles ne dépendent pas de la présence de champ magnétique dans le système et ont déjà été discutées dans le chapitre 2. Avec o l'indice du site de la cavité, la définition du champ de Weiss est :

$$\mathcal{G}_{oo}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \frac{1}{2} \sum_{\substack{jk \\ j \neq o \\ k \neq o}} \left(\tilde{t}_{oj} G_{ok}^{(o)}(i\omega_n) \tilde{t}_{ko} + \tilde{t}_{ok} G_{kj}^{(o)}(i\omega_n) \tilde{t}_{jo} \right) \quad (5.15)$$

$$= i\omega_n + \mu - \sum_{\substack{jk \\ j \neq o \\ k \neq o}} \tilde{t}_{oj} G_{ok}^{(o)}(i\omega_n) \tilde{t}_{ko}. \quad (5.16)$$

A partir de maintenant, on ne mentionnera plus l'absence du site de cavité dans la somme sur les sites du réseaux. Pour l'instant, il n'y a aucune différence entre le cas avec et sans champ magnétique. Le fait que la forme du champ de Weiss ne change pas par rapport au cas sans champ magnétique nous permet d'appliquer les solutionneurs d'impureté déjà développés pour la DMFT sans champ magnétique. Il faut cependant dériver la relation d'auto-cohérence qui lie le problème d'impureté quantique avec le problème du réseau interagissant, pour pouvoir avoir une théorie complète. Nous avons déjà discuté de l'invariance par translation de la fonction de Green locale dans la sous-section précédente. Cependant, il est clair que la fonction de Green du réseau avec l'impureté n'est pas invariante par translation et qu'il faudra être attentif aux indices de somme dans la suite de la dérivation. Utilisons la formule qui lie la fonction de Green du réseau avec la cavité et les fonctions de Green du réseau entier : $G_{ij}^{(o)}(i\omega_n) = G_{ij}(i\omega_n) - G_{io}(i\omega_n)G_{oj}(i\omega_n)/G_{oo}(i\omega_n)$. Le terme de somme dans l'équation 5.16 s'écrit alors :

$$\sum_{jk} \tilde{t}_{oj} G_{jk}^{(o)}(i\omega_n) \tilde{t}_{ko} = \sum_{jk} \left(\tilde{t}_{oj} G_{jk}(i\omega_n) \tilde{t}_{ko} - \tilde{t}_{oj} \frac{G_{jo}(i\omega_n)G_{ok}(i\omega_n)}{G_{oo}(i\omega_n)} \tilde{t}_{ko} \right). \quad (5.17)$$

En utilisant l'équation 5.10 sur le premier terme de droite, on obtient :

$$\sum_{jk} \tilde{t}_{oj} G_{jk}(i\omega_n) \tilde{t}_{ko} = \sum_k \tilde{t}_{ko} \sum_j \tilde{t}_{oj} G_{ok}(i\omega_n) \quad (5.18)$$

$$= \sum_k \tilde{t}_{ko} (\delta_{ok} - \tilde{z} G_{ok}(i\omega_n)) \quad (5.19)$$

$$= -\tilde{z} \sum_k \tilde{t}_{ko} G_{ok}(i\omega_n). \quad (5.20)$$

De même, le second terme de droite nous donne :

$$\frac{1}{G_{oo}} \sum_{jk} \tilde{t}_{lj} G_{jo}(i\omega_n) G_{ok}(i\omega_n) \tilde{t}_{ko} = \frac{1}{G_{oo}} \sum_k \tilde{t}_{ko} G_{ok}(i\omega_n) \sum_j \tilde{t}_{oj} G_{jo}(i\omega_n) \quad (5.21)$$

$$= \frac{1}{G_{oo}} \sum_k \tilde{t}_{ko} G_{ok}(i\omega_n) (1 - \tilde{z} G_{oo}(i\omega_n)) \quad (5.22)$$

$$= -\tilde{z} \sum_k \tilde{t}_{ko} G_{ok}(i\omega_n) + \frac{1}{G_{oo}} \sum_k \tilde{t}_{ko} G_{ok}(i\omega_n). \quad (5.23)$$

Le premier terme de l'équation 5.23 se simplifie avec le terme 5.20, ce qui nous donne :

$$\mathcal{G}_{oo}^{-1} = i\omega_n + \mu + \sum_k \frac{\tilde{t}_{ko} G_{ok}(i\omega_n)}{G_{oo}(i\omega_n)}. \quad (5.24)$$

Arrivé à ce stade, on peut réutiliser l'équation du mouvement alternative sur la fonction de Green locale :

$$\tilde{z} G_{oo} = 1 - \sum_k G_{ok} \tilde{t}_{ko}, \quad (5.25)$$

ce qui nous donne, finalement, la relation d'auto-cohérence bien connue de la DMFT :

$$\mathcal{G}^{-1} = G_{oo}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n). \quad (5.26)$$

À la différence de la dérivation présentée dans la thèse d'Arsenault [69], cette démonstration ne repose pas sur l'existence d'une fonction de Green invariante sous translation \bar{G} ni ne prend comme hypothèse le caractère réel des termes de saut t_{ij} . Nous avons toutefois utilisé la self-énergie invariante sous translation pour prouver que la self-énergie locale ne dépend pas du site du réseau, malgré l'existence d'une cellule unité magnétique.

Cela conclut notre dérivation de la DMFT pour des systèmes soumis à des champs magnétiques uniformes.

Comment se fait-il que la relation d'auto-cohérence de la DMFT ne se trouve pas affectée par la présence d'un champ magnétique externe ? Une façon de répondre à cette question est de rappeler que la DMFT est une théorie de champ moyen pour les fluctuations spatiales bien qu'elle traite exactement les fluctuations temporelles locales. En effet, l'effet orbital n'est pris en compte que dans la fonction d'hybridation $\Delta(i\omega_n)$ dans le paradigme de la DMFT avec champ magnétique (cf. équation 5.16). De ce fait, les effets des fluctuations spatiales des propriétés locales du système comme la self-énergie ne sont pas vitaux dans la résolution dynamique du système. Ce n'est pas le cas pour les extensions sur amas de la DMFT [107] telles que la théorie de champ moyen dynamique sur amas [108, 109] (CDMFT, *Cluster Dynamical mean-field theory*) et l'approximation de l'amas dynamique [110] (DCA, *Dynamical cluster approximation*). Comme ces dernières prennent en compte une partie des fluctuations spatiales, elles sont inadaptées pour décrire l'effet orbital dans des réseaux interagissant¹.

1. Cette affirmation n'est pas valable lorsque l'amas fait la taille de la cellule unité magnétique.

5.3 Application à un réseau carré avec interaction d'Hubbard

Pour illustrer la pertinence de la DMFT en présence d'un champ magnétique uniforme, nous l'appliquons au modèle d'Hubbard sur un réseau carré avec le solveur d'impureté IPT présenté dans la section 2.5. Avant de rentrer dans les détails des résultats, on peut facilement se convaincre que le comportement asymptotique de la fonction d'hybridation reste inchangé en présence ou non d'un champ magnétique.

Pour se faire, basons-nous sur l'équation 2.72 et remarquons que la substitution de Peierls n'affecte que les termes de saut, c'est-à-dire les termes hors diagonaux de l'Hamiltonien \mathbf{H}^0 . De plus, comme la phase de Peierls change de signe lorsque l'on prend le transposé de l'Hamiltonien, le terme $\text{Tr} \mathbf{H}^0 \mathbf{H}^0 / N = \sum_{ij} H_{ij}^0 H_{ji}^0 / N$ ne dépend pas du champ magnétique. Le solveur d'impureté peut être utilisé sans être fondamentalement changé vis-à-vis de son implémentation sans champ magnétique. Il «suffit» de prendre en compte la nouvelle dispersion d'énergie des électrons dans le bain pour implémenter la DMFT avec champ magnétique dans le paradigme du solveur d'impureté IPT.

Pour l'ensemble des résultats présentés ci-après, nous prendrons les unités naturelles comme système d'unités ($\hbar = k_B = c = 1$). De plus, le terme de saut aux premiers voisins t est pris comme unité d'énergie. Dans un souci de lisibilité, nous omettrons de le spécifier dans la suite de cette section.

5.3.1 Effet du champ magnétique sur la self-énergie

La figure 5.3 présente différentes self-énergies à $U = 2$ et $\beta = 100$, pour trois valeurs différentes de champ magnétique en fonction de fréquence de Matsubara. Ces trois valeurs représentent les différents régimes physiques dus au champ magnétique : $p/q = 0$ correspond au réseau carré en absence de champ magnétique, $p/q = 1/100$ correspond au régime de Landau et enfin, le cas $p/q = 1/10$ correspond au régime d'Hofstadter, c'est-à-dire que l'on commence à reconnaître les structures caractéristiques du papillon d'Hofstadter.

Il est intéressant de noter que l'effet orbital dû au champ magnétique a un impact significatif seulement dans le régime d'Hofstadter, les self-énergies pour $p/q = 0$ et $p/q = 1/100$ étant quasiment identiques sauf pour les premières fréquences de Matsubara (non montré ici). Ces résultats s'expliquent essentiellement grâce à l'équation d'auto-cohérence de la DMFT. En effet, dans le cas d'un système à une bande et avec une self-énergie indépendante des moments \mathbf{k} , la fonction de Green locale peut s'écrire de la façon suivante :

$$G(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{N(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma(i\omega_n)}, \quad (5.27)$$

où $N(\epsilon)$ est la densité d'états locale non interagissante. Cette formule met en évidence l'importance de la densité d'états dans la fonction de Green locale et donc dans la boucle d'auto-cohérence de la

DMFT. Dans le régime d'Hofstadter, la densité d'états change totalement de topologie et n'a plus grand-chose à voir avec la densité d'états sans champ magnétique. Il est donc normal de voir un fort changement dans la self-énergie. A contrario, lorsque le densité est caractérisée par la présence de pics de Landau et que la température du système est suffisamment élevée de telle sorte que l'écart entre deux fréquences de Matsubara ω_n soit plus grand que la séparation en énergie des niveaux de Landau, alors l'effet de ces derniers dans la self-énergie sera minime et ils n'affecteront cette dernière que pour les toutes premières fréquences de Matsubara.

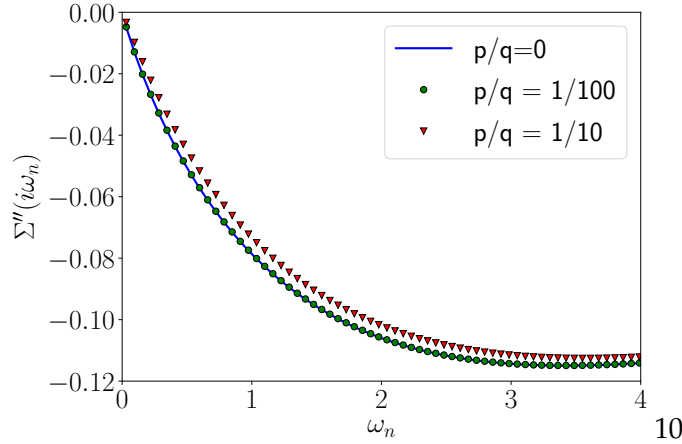


FIGURE 5.3 Self-énergie en fonction des premières fréquences de Matsubara pour différentes valeurs de champs magnétiques. $p/q = 0$ correspond au cas en l'absence de champ magnétique, $p/q = 1/100$ correspond au régime de Landau et $p/q = 1/10$ correspond au régime de Hofstadter.

Cette propriété indique aussi que les solveurs d'impureté comme les Monte-Carlo quantiques ne sont pas adaptés pour sonder des effets aussi petits du fait des erreurs statistiques inhérentes à leur fonctionnement et de leur limitation en température². Un solveur fonctionnant directement en fréquences réelles comme le groupe de renormalisation numérique [111] est donc à préférer.

Enfin, nous n'entrerons pas dans une étude systématique du régime d'Hofstadter puisque cela a été fait dans le passé [112, 113, 114, 115, 103, 116]. Une avenue de recherche possible grâce à la simplicité du formalisme de la DMFT sous champ magnétique serait d'étudier plus finement la transition entre le régime de Landau et le régime d'Hofstadter par le biais de la self-énergie.

5.3.2 Renormalisation des niveaux de Landau

Une façon de voir l'effet combiné des interactions et du champ magnétique est de se concentrer sur la position des pics de Landau dans la densité d'états locale. À champ magnétique et densité électronique constants, la position en énergies des pics de Landau change avec U . Ce phénomène est illustré par la figure 5.4(a) qui nous montre des densités d'état locales pour différentes valeurs

2. Nous ne parlons pas des Monte-Carlo fonctionnant à température nulle comme les Monte-Carlo variationnels.

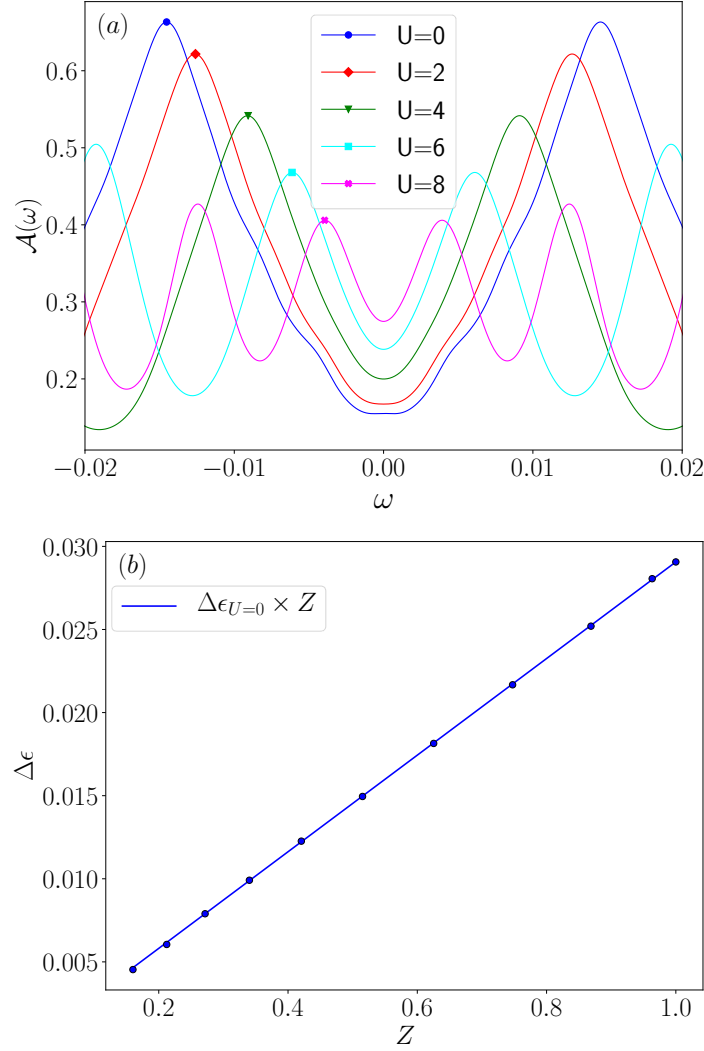


FIGURE 5.4 a) Densité d'états locale en fréquences réelles pour différentes valeurs du terme d'Hubbard U . La température et le champ magnétique sont respectivement fixés à $\beta = 100$ et $p/q = 1/100$. b) Différence d'énergie $\Delta\epsilon_U$ des deux pics de Landau les plus proches du niveau de Fermi en fonction du poids spectral pour les mêmes valeurs de β et p/q que précédemment. La droite continue est la fonction $Z \times \Delta\epsilon_{U=0}$, c'est-à-dire, la différence d'énergie des niveaux de Landau en l'absence d'interaction multipliée par Z , le poids de quasi-particules.

d'interactions d'Hubbard autour du niveau de Fermi à $p/q = 1/100$ et $\beta = 100$. Ce changement est induit par la renormalisation de la masse des quasi-particules due aux interactions. En effet, en DMFT dans le régime de Landau, la densité d'états locale s'écrit :

$$A(\omega) = -2 \sum_n \frac{\Sigma''(\omega)}{(\omega + \mu - \epsilon_n - \Sigma'(\omega))^2 + \Sigma''(\omega)^2}. \quad (5.28)$$

On a encore décomposé la self-énergie en partie réelle et imaginaire $\Sigma = \Sigma' + i\Sigma''$ et les niveaux de Landau sont notés ϵ_n . Si l'on fait un développement de la partie réelle de la self-énergie autour de

$\omega = 0$ comme on a l'habitude de faire dans la théorie des liquides de Fermi-Landau, on obtient la densité d'états des quasi-particules :

$$A^{Q.P.}(\omega) = \sum_n \frac{\tau^{-1}}{(\omega - Z\epsilon_n)^2 + \left(\frac{1}{2\tau}\right)^2}, \quad (5.29)$$

le potentiel chimique μ se simplifiant avec $\Sigma'(\omega = 0)$ à demi remplissage. De plus, on a utilisé les définitions habituelles du poids et du temps de demi-vie des quasi-particules déjà introduites dans le chapitre 3 grâce aux équations 3.11 et 3.12.

Les niveaux de Landau ϵ_n proches du niveau de Fermi sont donc renormalisés par Z dans cette approche de quasi-particule. Cette renormalisation peut être vue physiquement comme une renormalisation de la fréquence cyclotron par le changement de masse des quasi-particules. En effet, dans le cas d'une self-énergie purement locale, le rapport entre la masse sans interaction et la masse effective des particules m/m^* est exactement égal à Z . La fréquence cyclotron sans interaction $\omega_c = eB/m$ se retrouve redéfinie comme $\omega_c^* = eB/m^*$ pour des niveaux de Landau de la forme $\epsilon_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$. On peut vérifier cela en comparant la différence d'énergie entre les deux pics de Landau autour de $\omega = 0$ en fonction des interactions. On remarque alors que la valeur de cette différence que l'on appelle $\Delta\epsilon_U$ est dictée par le poids de quasi-particules comme on peut le voir sur la figure 5.4(b) où l'on a tracé $\Delta\epsilon_U$ en fonction de Z . La ligne continue n'est pas un lissage linéaire, mais la fonction $Z\Delta\epsilon_{U=0}$ soit le poids des quasi-particules multiplié par la différence d'énergies des deux pics en l'absence d'interaction.

On pourrait alors penser que cela rentre en contradiction avec le théorème de Kohn [117] qui atteste que la fréquence de cyclotron et la période des oscillations quantique dans l'aimantation sont indépendantes des interactions entre électrons. Cependant, ce théorème n'est valable que pour des fonctions de corrélations du type aimantation-aimantation qui font intervenir des fonctions de corrélation particule-trou. Le densité d'états à une particule est donc hors du champ d'application du théorème.

5.3.3 Oscillations quantiques dans le temps de demi-vie des quasi-particules

Dans les métaux, un des effets les plus spectaculaires de l'effet orbital sur des observables physiques est l'apparition d'oscillations dites quantiques. Ces oscillations tirent leur origine de l'aire de la surface de Fermi perpendiculaire au champ magnétique [24]. Nous pouvons sonder ces oscillations avec la DMFT en étudiant le temps de demi-vie des quasi-particules τ .

En effet, nous avons déjà rencontré cette observable physique dans l'équation 3.12. À partir de la self-énergie fonction des fréquences de Matsubara, nous pouvons extraire son comportement à fréquence nulle en faisant une simple extrapolation polynomiale sur les premières fréquences de Matsubara³. La figure 5.5(a) représente $\tau_{B=0}/\tau_B$ en fonction de q/p pour une densité électronique

3. Nous avons aussi vérifié l'exactitude de notre extrapolation avec un prolongement analytique utilisant la

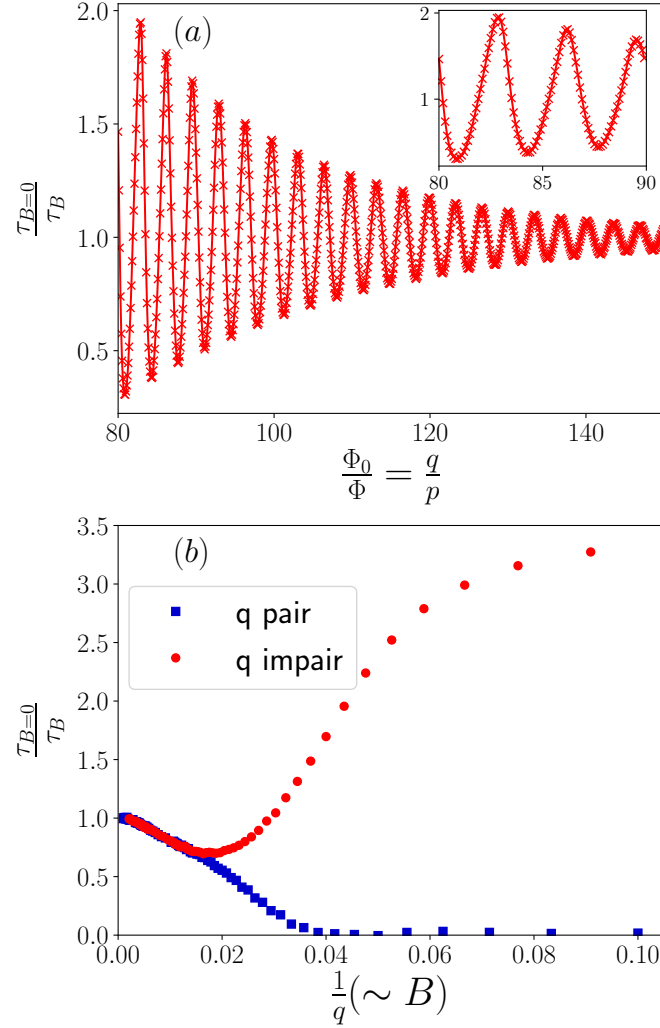


FIGURE 5.5 a) Inverse du temps de demi-vie des quasi-particules avec $U = 4$, $\beta = 80$ et $n = 0.6$ en fonction de q/p . Comme l'inverse du rapport de flux est directement proportionnel à l'inverse du champ magnétique, on retrouve ici les oscillations quantiques. Le petit panneau est un agrandissement de la même figure à haut champ magnétique. L'asymétrie entre le maximum et le minimum des pics pourrait être le début de l'effet Hall quantique. b) Inverse du temps de demi-vie en fonction de $1/q$ pour $U = 4$ et $\beta = 80$ à demi-remplissage. Les deux limites des temps de demi-vie reflètent les deux phases qu'à le papillon de Hofstadter en fonction de la parité de q . Le papillon exhibe un comportement semi-métallique lorsque q est pair et métallique lorsque q est impair.

égale à $n = 0.6$ à $\beta = 80$ et $U = 4$. Le rapport q/p étant inversement proportionnel champ magnétique, on retrouve bien la physique attendue en présence de niveaux de Landau. On peut voir ses oscillations comme l'effet Shubnikov-de Haas. En effet, le temps de demi-vie des quasi-particules est souvent utilisé comme une approximation du temps de demi-vie de transport dans la conductivité de Drude.

méthode des approximants de Padé. Les valeurs sont quantitativement similaires, Padé donnant dans certains cas des résultats non physiques, c'est-à-dire des temps de vie de quasi-particules négatifs.

Mieux encore, le panneau de la figure est un agrandissement dans le régime de Landau mais à fort champ magnétique. On remarque qu'une asymétrie commence à se montrer lorsque l'on compare les maxima avec les minima des oscillations. Cette asymétrie pourrait être le signe de l'approche de l'effet Hall quantique. En effet, les pics de Landau étant de plus en plus éloignés entre eux à mesure que le champ magnétique augmente, le système devient alors sensible à la position du potentiel chimique. Lorsque ce dernier se trouve entre deux pics, le système est isolant ce qui se traduit par un temps de demi-vie nul (et donc une conductivité de Drude nulle aussi). Inversement, un pic de Landau se traduisant par une valeur finie de la densité d'états du système, on s'attend à ce que le temps de demi-vie ait une valeur finie aussi.

Il est à noter que les oscillations proviennent essentiellement de la partie imaginaire de la self-énergie. Le poids de quasi-particules a aussi un comportement oscillant, mais avec une amplitude extrêmement faible (de l'ordre de 10^{-4}). Cette faible amplitude d'oscillation vient du fait que la partie imaginaire de la self-énergie à fréquence nulle est plus sensible à la surface de Fermi que Z . En effet, le poids de quasi-particules est une fonction de la partie réelle de la self-énergie qui est sensible à des processus virtuels sur plusieurs échelles d'énergie par le biais des relations de Kramers-Kronig.

La figure 5.5(b) illustre deux comportements distincts du temps de demi-vie à champ magnétique suffisamment fort⁴ en fonction de $1/q$ lorsque le système est à demi rempli. On remarque que le temps de demi-vie tend vers zéro lorsque l'on augmente le champ magnétique en prenant q pair alors qu'il tend vers une valeur finie lorsque l'on augmente le champ en prenant q impair. Ce phénomène est directement relié à la physique d'Hofstadter. En effet, lorsque q est impair, le papillon exhibe une phase métallique caractérisée par une densité d'états finie au niveau de Fermi. Cependant, pour les valeurs de q pair, le système est dans une phase semi-métallique avec q cônes de Dirac non équivalents dans la zone de Brillouin magnétique [101]. La DMFT arrive donc à capturer ces deux phases via le temps de demi-vie des quasi-particules. On pourrait se demander pourquoi à faible champ magnétique et à demi remplissage, le temps de demi-vie normalisé ne reste pas constant. En effet, ce dernier ne devrait pas être très sensible aux détails de la densité d'états lorsque la température est grande par rapport au champ magnétique, ce qui devrait se traduire par l'existence d'un plateau dans la figure 5.5(b). Cet argument s'appliquerait si l'on pouvait définir des niveaux de Landau sur le réseau carré à demi rempli, mais cela est impossible à cause de la présence d'une singularité de Van-Hove. Il est alors difficile de donner une masse de bande et donc de définir une fréquence cyclotron et des niveaux de Landau.

4. Comparé à la température.

5.4 Résumé

Ce chapitre a abordé l'effet orbital dû à un champ magnétique externe et uniforme dans le paradigme de la DMFT.

Il est important de remarquer que même dans le cas d'électrons libres, la prise en compte du potentiel cristallin et du champ magnétique n'est pas une tâche aisée. En effet, le champ magnétique brise l'invariance par translation originale du réseau. On peut néanmoins redéfinir un nouvel opérateur de translation «magnétique» et de nouveaux vecteurs du réseau lorsque le rapport entre le flux magnétique traversant une *plaquette* du réseau et le quantum de flux magnétique s'écrit comme le rapport de deux nombres entiers copremiers. Dans ce cas précis, on peut aussi définir une cellule unité magnétique plus grande que la cellule unité du réseau sans champ magnétique. Enfin, lorsque le rapport de flux $n_\Phi = p/q$ est suffisamment grand, plus précisément lorsque q est de l'ordre de l'unité, on découvre une riche physique dont la manifestation la plus remarquable est le fameux papillon de Hofstadter. Cette figure géométrique représentant les énergies propres d'électrons dans un réseau carré soumis à un champ magnétique externe, présente d'intéressantes propriétés topologiques qui sont encore étudiées de nos jours.

L'application d'un champ magnétique externe sur un système devrait rendre l'application de la DMFT compliquée. En effet, même si rien n'empêche de résoudre q problèmes d'impureté si $n_\Phi = p/q$, q peut être monstrueusement grand lorsque l'on s'intéresse au régime de Landau. De plus, même dans le régime de Hofstadter, il y a un intérêt scientifique à étudier des rapports de flux du type 100/301 qui, même si très proche de 1/3, ne donne pas le même spectre d'énergie. Heureusement, nous avons prouvé que les équations de la DMFT restent inchangées. Cela vient du fait que la DMFT repose sur une physique locale qui ne dépend pas vraiment de la position du site dans le réseau. Cette démonstration facilite énormément l'application de la DMFT lorsqu'un champ magnétique uniforme est appliqué au réseau puisqu'il suffit de résoudre un seul problème d'impureté au lieu de q .

L'application de la DMFT sur un réseau carré soumis à un champ magnétique perpendiculaire à son plan nous permet de retrouver un bon nombre de propriétés physiques bien connues des physiciens. Ainsi à température finie, les parties réelles et imaginaires de la self-énergie en fonction de la fréquence de Matsubara dépendent peu du champ magnétique externe dans le régime de Landau. Mathématiquement, cela vient du caractère purement imaginaire de ces fréquences qui vont rapidement adoucir les détails de la densité d'états. Cela indique qu'un solveur d'impureté fonctionnant à fréquences réelles directement est souhaitable pour étudier le problème des électrons interagissants sous champ magnétique. Dans le régime de Hofstadter, la self-énergie est significativement affectée par le champ magnétique, ce qui s'explique par le changement complet de la topologie de l'énergie de dispersion.

La DMFT arrive aussi à capturer des effets combinés du champ magnétique et des interactions. Ainsi, on peut observer une renormalisation des niveaux de Landau due aux interactions. Dans une approche de quasi-particules, cet effet peut être compris comme une renormalisation de la pulsation

cyclotron du fait de la masse effective des quasi-particules. L'approche des quasi-particule est aussi pertinente puisqu'elle permet de suivre l'effet du champ magnétique sur le temps de demi-vie des particules. Dans le régime de Landau, ce temps de diffusion exhibe des oscillations quantiques que l'on peut rapprocher de l'effet Shubnikov-de Haas dans la conductivité de Drude. Dans le régime d'Hofstadter, le temps de demi-vie est une sonde de la phase physique du système. En effet, lorsque le rapport de flux n_Φ est égal à $1/q$, deux limites à fort champs sont visibles traduisant des phases métallique ou semi-métallique dépendamment de la parité de q .

Chapitre 6

Semi-métaux de Weyl sous champ magnétique : magnétorésistance négative et interaction

Introduction

Les propriétés des semi-métaux de Weyl lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique externe sont extrêmement intéressantes à étudier puisqu'ils promettent, du moins théoriquement, une physique exotique. Nous avons déjà discuté dans le chapitre 1 de l'anomalie chirale et ses conséquences sur les propriétés de transport, notamment l'apparition d'une magnéto-résistance négative lorsque le champ magnétique est dans la même direction que le courant électrique. Grâce au formalisme de la DMFT et donc à la possibilité d'étudier de façon rigoureuse les corrélations électroniques dans des systèmes soumis à un champ magnétique externe, on peut étudier les effets des interactions sur les propriétés de transport des semi-métaux de Weyl.

La section 6.1 est consacrée aux propriétés générales de notre modèle sur réseau tenant compte de l'effet orbital induit par un champ magnétique externe. Comme dans le chapitre précédent, nous choisissons tout au long de ce chapitre un rapport de flux magnétique rationnel valant $1/q$. Une discussion sur l'effet des interactions dans ce système est présentée dans la sous-section 6.1.2. La section 6.2 est dédiée à l'étude de la conductivité optique dans deux limites de champ magnétique : la limite des champs modérés avec $q = 40$ et la limite quantique où l'influence des niveaux de Landau chiraux est majoritaire avec $q = 16$. Un balayage en température permet de mettre en exergue deux régimes de température distincts qui sont visibles dans la double occupation et dans la conductivité optique.

6.1 Effet orbital du champ magnétique

La modification de l'énergie de dispersion au niveau d'un nœud soumis à un champ magnétique externe a déjà été abordé dans le cas d'un modèle effectif dans le chapitre 1. Dans cette section, nous allons voir l'effet d'un champ magnétique sur un modèle sur réseau ainsi que les effets combinés d'une interaction de type Hubbard et d'un champ magnétique sur les propriétés générales d'un semi-métal de Weyl.

6.1.1 Structure de bande et densité d'états

En suivant la même approche développée dans le chapitre 5 pour un champ magnétique statique et uniforme d'amplitude B le long de la direction z , c'est-à-dire en prenant un rapport de flux magnétique n_Φ rationnel égal à $1/q$ ainsi qu'en faisant une substitution de Peierls sur le modèle 3.1, on peut écrire la matrice d'Harper avec la convention suivante :

$$\mathbf{H}_{Harp} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\uparrow\uparrow} & \mathbf{H}_{\uparrow\downarrow} \\ \mathbf{H}_{\downarrow\uparrow} & \mathbf{H}_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

où les composantes de la matrice \mathbf{H}_{Harp} sont des matrices de taille $q \times q$. Ainsi, les définitions de ces matrices sont :

$$\mathbf{H}_{\uparrow\uparrow} = \begin{pmatrix} M_0 & -t & 0 & \dots & -t \\ -t & M_1 & -t & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -t & 0 & \dots & -t & M_{q-1} \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

$$\mathbf{H}_{\uparrow\downarrow} = \begin{pmatrix} A_0 & -it & 0 & \dots & it \\ it & A_1 & -it & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -it & 0 & \dots & it & A_{q-1} \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

$$\mathbf{H}_{\downarrow\downarrow} = -\mathbf{H}_{\uparrow\uparrow}, \quad (6.4)$$

et

$$\mathbf{H}_{\downarrow\uparrow} = \mathbf{H}_{\uparrow\downarrow}^\dagger \quad (6.5)$$

avec $M_n = -2t \cos(k_y + 2\pi n/q) - 2t \cos(k_z)$ et $A_n = 2it \sin(k_y + 2\pi n/q)$. Comme d'habitude, le terme de saut t est fixé comme l'unité d'énergie dans la suite de ce chapitre.

Pour les valeurs de q utilisées dans la suite de ce chapitre, la matrice de Harper est suffisamment grande pour ne pas avoir à prendre en compte les dépendances en k_x dont l'origine vient de la périodicité de la cellule unité magnétique. On se place donc toujours dans le régime de Landau défini dans le chapitre précédent. Dans cette approximation, l'Hamiltonien libre du modèle 3.1 s'écrit de la façon suivante :

$$\hat{\mathbf{H}}_0 = \sum_{k_y, k_z} \hat{\mathbf{C}}^\dagger \mathbf{H}_{\text{Harper}} \hat{\mathbf{C}} - \mu \sum_i \hat{n}_i. \quad (6.6)$$

Ici, les opérateurs création et destruction sont définis dans la base des spins : $\hat{\mathbf{C}}_{k_y, k_z}^{(\dagger)} = (\hat{c}_{1, k_y, k_z, \uparrow}, \hat{c}_{2, k_y, k_z, \uparrow} \dots \hat{c}_{q, k_y, k_z, \downarrow})$ et les indices n et σ représentent respectivement l'indice du site dans la cellule unité magnétique et le spin associé à la particule.

Grâce à ce formalisme, on a directement accès aux niveaux de Landau en diagonalisant la matrice de Harper. Dans la suite de ce travail, nous choisirons deux valeurs de q caractérisant le régime des champs magnétiques modérés ($q = 40$) et la limite quantique où le champ magnétique est suffisamment élevé pour éloigner les premiers niveau de Landau non chiraux du niveau de Fermi et ne laisser contribuer aux propriétés sensibles au niveau de Fermi que les niveaux de Landau chiraux ($q = 16$)¹.

Une énergie de dispersion typique le long de la direction k_z est tracée dans la figures 6.1(a). Ainsi, on reconnaît facilement des structures familières autour de $k_z = \pm\pi/2$. Il s'agit précisément de l'énergie de dispersion de nœuds de Weyl soumis à un champ magnétique externe. Même s'il semble n'y avoir qu'une paire de nœuds, il faut se rappeler que le modèle sans champ magnétique compte quatre nœuds de Weyl au total et surtout que les nœuds de même chiralité sont situés sur les mêmes points de l'axe z . Ainsi, lorsque l'on soumet un champ magnétique le long de cet axe, leur projection va donner l'illusion qu'il ne s'agit que d'un seul nœud.

Enfin, quelques mots sur les densités d'états locales en présence d'un champ magnétique. Nous avons illustré la densité d'états partielle locale pour $q = 16$ dans la figure 6.1 (b). Comme dans le modèle effectif, les niveaux de Landau chiraux ne contribuent qu'à une seule densité d'états partielle, celle des spins \downarrow . De plus, nous nous trouvons dans la limite quantique ce qui explique l'absence de niveaux de Landau non-chiraux dans le domaine de définition des bandes électroniques linéaires de notre modèle (c'est-à-dire pour $\omega \in [-2, 2]$). La densité d'états totale est alors essentiellement constante jusqu'à $|\omega| \approx 2$.

6.1.2 Interaction et champ magnétique

Avant de discuter des effets des interactions, un petit mot sur la méthode utilisée. Pour résoudre le problème d'un semi-métal de Weyl en interaction et soumis à un champ magnétique externe, nous avons utilisé la DMFT sous champ magnétique [95] avec un solveur d'impureté basé sur la diagonalisation exacte. Grâce au chapitre précédent, nous avons vu qu'il suffisait de résoudre un

1. Il faut aussi noter que $q = 16$ est la valeur minimale que l'on peut prendre tout en négligeant la périodicité de la matrice de Harper. Pour les valeurs plus faibles, cette approximation n'est plus valable.

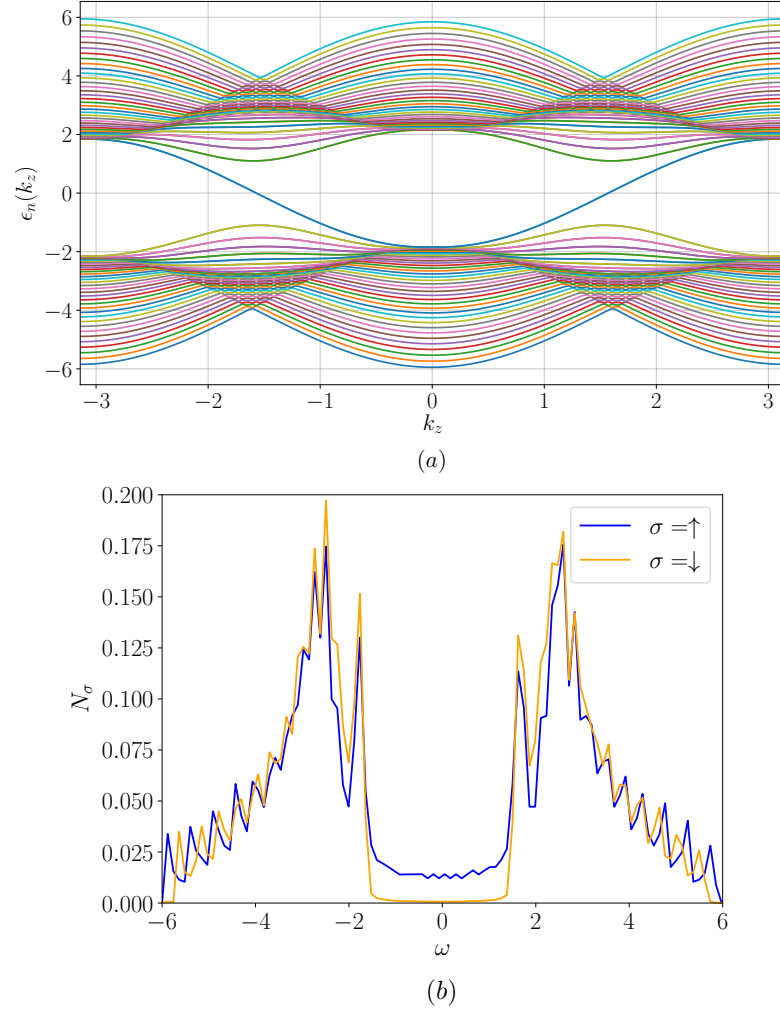


FIGURE 6.1 a) Dispersion des niveaux de Landau en fonction du moment k_z pour $q = 40$ à demi-remplissage. Les niveaux de Landau chiraux sont bien visibles à $k_z = \pm\pi/2$. b) Densité d'états partielle pour $q = 16$. Le caractère un peu abrupte et asymétrique de cette densité vient de l'échantillonnage des énergies de dispersion qui demande un grand nombre de moments k_z et qui peut-être coûteux à obtenir numériquement. Cette figure permet néanmoins de constater l'absence de contribution des niveaux de Landau chiraux pour les spins \downarrow .

seul problème d'impureté et utiliser la self-énergie obtenue dans la boucle d'auto-cohérence. Cependant, pour prendre en compte l'aspect multi-orbital qu'entraîne l'ajout d'un champ magnétique, on construit quand même une cellule unité magnétique. Cette cellule nous permet d'obtenir les énergies de sites de bain et les termes d'hybridation pour chacun des sites de la cellule unité magnétique et ainsi satisfaire la relation d'auto-cohérence de la DMFT. En terme de coût numérique, la partie la plus coûteuse dans la boucle de la DMFT est la résolution du problème d'impureté et non la détermination des paramètres variationnels. Or la self-énergie ne dépendant pas de la position du site dans la cellule unité magnétique, on ne résout qu'un seul problème d'impureté par itération et donc cet artifice algorithmique n'a qu'un coût numérique minime.

Naïvement, on pourrait penser qu'avec cette approche, on multiplie l'erreur introduite dans la détermination des énergies de sites de bain et dans les termes d'hybridation par q puisqu'on détermine ces énergies q fois par itération. Cependant, si l'on suppose que les erreurs introduites lors de ce processus sont indépendantes et uniformément distribuées, alors il suffit de multiplier le seuil de tolérance dans la convergence de la relation d'auto-cohérence pour une impureté par \sqrt{q} . Cette affirmation n'est bien évidemment pas rigoureusement prouvée mais elle s'est retrouvée toujours respectée dans la pratique. De plus, l'approche naïve qui consiste à multiplier le critère de convergence par q ne s'est pas révélée optimale en terme de convergence car il a toujours été possible de minimiser la fonction de distance 2.74 en dessous du seuil *naïf*.

Ainsi l'ensemble des résultats présentés dans ce chapitre a été obtenu à l'aide de cinq sites de bain. On a fixé le critère de convergence absolu de la fonction de distance à $0.00002t \times \sqrt{q}$ et un maximum de 1024 fréquences de Matsubara dans le processus de minimisation.

A la manière du chapitre précédent, commençons par comparer l'effet orbital du champ magnétique sur la self-énergie de semi-métaux de Weyl. Nous comparons trois régimes magnétiques différents à basse température ($\beta = 80$) : le cas sans champ magnétique, soit $q = \infty$, le cas où $q = 40$ c'est-à-dire où le champ magnétique est relativement fort et enfin le cas où $q = 16$, c'est-à-dire dans la limite quantique. La figure 6.2(a) illustre nos résultats pour les premières fréquences de Matsubara à $\beta = 80$ et $U = 12$. Ainsi, il semble qu'à la manière du réseau carré soumis à un champ magnétique, l'effet du champ magnétique n'a pas de grands effets sur la self-énergie. Dans le cas où $q = 40$, il n'y a que peu de différences avec la self-énergie sans champ magnétique. Les différences sont plus marquées en comparant cette dernière avec les résultats à $q = 16$ puisque les self-énergies s'éloignent l'une de l'autre à mesure que les fréquences de Matsubara augmentent. Cela vient du fait que la densité d'états locale est profondément modifiée par le champ magnétique sur une large plage de fréquences. Il est aussi intéressant de noter que malgré ces différences, les trois self-énergies ont la même valeur à la première fréquence de Matsubara. Il semble donc que les propriétés déjà vues dans le chapitre 3 soient aussi d'actualité lorsque le système est soumis à un champ magnétique, à savoir que les propriétés de quasi-particules soient robustes sur une large plage de valeurs de U .

En présence de corrélations, la densité d'états locale d'un semi-métal de Weyl soumis à un champ magnétique est grossièrement similaire à celle d'un semi-métal de Weyl sans champ magnétique (cf. figure 6.2(d)). Ainsi, on retrouve les trois grandes structures déjà discutées dans le chapitre 3 à savoir les deux bandes de Hubbard ainsi que la partie correspondant aux excitations de quasi-particules. Il est important de remarquer que malgré la tendance du poids de quasi-particules Z à rétrécir la structure correspondant aux excitations cohérentes, la densité d'états au niveau de Fermi reste la même avec ou sans interaction. Deux explications peuvent être apportées pour expliquer ce fait. La première explication repose sur la règle de somme de Friedel [118, 119]. Cette règle, dérivée dans le cadre d'une impureté dans un métal s'applique à la DMFT puisque cette dernière repose sur un problème d'impureté. Elle stipule que la densité d'états au niveau de Fermi reste inchangée malgré la présence d'interactions dans le système. La seconde explication est plus mathématique et repose sur la densité d'états des niveaux de Landau chiraux. En effet, la densité d'états locale d'un niveau

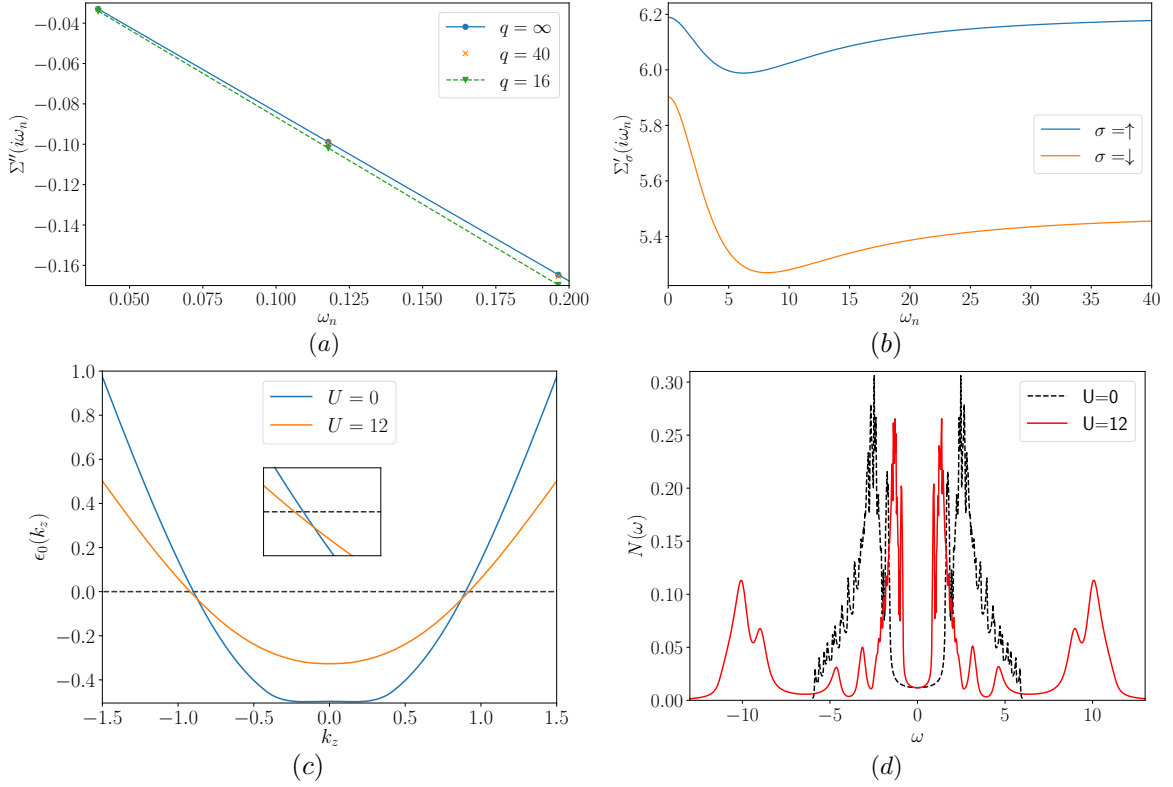


FIGURE 6.2 a) Partie imaginaire de self-énergies à $U = 12$ et à demi-remplissage en fonction des fréquences de Matsubara en absence de champ magnétique ($q = \infty$) et pour $q = 40$ et $q = 16$. Seules les premières fréquences de Matsubara sont présentées pour mieux visualiser les différences. b) Partie réelle de la self-énergie en fonction des fréquences de Matsubara pour $q = 16$, $U = 12$ et $\mu = 5.1$. Cette valeur de potentiel chimique correspond à une densité électronique de 0.974. c) Niveaux chiraux en fonction du moment k_z pour $U = 0$ (en bleu) et pour une approche de quasi-particules à partir des résultats DMFT à $U = 12$ (en orange). Le panneau est un agrandissement de la région autour de $k_z = -\pi/2$. Quelle que soit la valeur de l'interaction d'Hubbard, la densité électronique est fixée à $n = 0.974$. d) Densités d'états locales en fonction de fréquences réelles à $U = 0$ (ligne noire en pointillé) et à $U = 12$ (ligne rouge continue) pour $q = 40$ à demi-remplissage. On a utilisé une largeur de Lorentzienne $\eta = 0.02$ pour obtenir ces densités. L'ensemble des calculs a été fait à $\beta = 80$.

chiral de chiralité χ et de vitesse de Fermi v_F est proportionnelle à :

$$N(\omega) \propto \int_{-k_c}^{k_c} dk_z \delta(\omega - \chi v_F k_z) = \frac{\theta(\frac{\omega}{v_F} + k_c) - \theta(\frac{\omega}{v_F} - k_c)}{|v_F|}, \quad (6.7)$$

avec k_c , un cut-off en énergie. Lorsque l'on effectue une approche de quasi-particules, cette densité d'états est insensible au poids de quasi-particules Z . En effet, soit $\tilde{v}_F = Z v_F$, la vitesse de Fermi renormalisée, la densité d'états locale s'écrit :

$$N(\omega) \propto Z \int_{-k_c}^{k_c} dk_z \delta(\omega - \chi \tilde{v}_F k_z) = \frac{\theta(\frac{\omega}{\tilde{v}_F} + k_c) - \theta(\frac{\omega}{\tilde{v}_F} - k_c)}{|v_F|}. \quad (6.8)$$

Cette dernière est donc insensible au poids de quasi-particules pour ce qui est de sa valeur mais son domaine de définition se voit rétrécir à cause de Z .

Un petit mot sur la densité d'états locale avec interaction qui ne présente pas les multiples pics abrupts alors que l'on a utilisé le même solveur d'impureté que dans la figure 3.1 : cela vient du fait que l'on a effectué un prolongement analytique avec une largeur de Lorentzienne égale à 0.02 ce qui a pour effet d'élargir ces fameux pics abrupts et d'adoucir énormément la figure.

Loin du demi-remplissage, les self-énergies correspondant aux spins \uparrow et \downarrow acquièrent des valeurs différentes l'une de l'autre comme le montre la figure 6.2(b) représentant les parties réelles des deux espèces de spin en fonction des fréquences de Matsubara à $\beta = 80$, $U = 12$ et $\mu = 5.1$. En plus d'un comportement en fréquences différent, les deux self-énergies tendent vers des valeurs différentes lorsque $\omega_n \rightarrow 0$. On peut comprendre ce phénomène grâce aux densités électroniques de chaque espèce de spin. En effet, du fait de la présence d'une densité d'états finie à demi-remplissage pour les spins \downarrow , ces derniers seront plus sensibles au changement de potentiel chimique que les spins \uparrow où un gap est présent. Ils auront donc au moins une valeur de self-énergie Hartree-Fock plus faible comparée aux spins \uparrow . Malgré cette différence dans les corrélations électroniques, il semble que cela affecte peu les positions des nœuds chiraux dans l'espace réciproque. En effet, on peut appliquer une approche de quasi-particules en calculant numériquement les énergies propres de l'Hamiltonien de quasi-particules associées à ce système à partir de la formule 3.14 et les comparer avec les énergies propres de l'Hamiltonien libre à la même densité. On a représenté les niveaux chiraux avec et sans interaction au voisinage du niveau de Fermi dans la figure 6.2(c). Il semble que la différence en position des nœuds est très faible et peu facilement ne pas être mesurable à cause d'un peu de désordre dans l'échantillon par exemple.

Il serait intéressant de vérifier l'impact des corrélations et du dopage des semi-métaux de Weyl soumis à un champ magnétique sur l'effet Hall. Dans ce cas, la conductivité transverse σ_{xy} aura deux contributions distinctes : un effet Hall non topologique qui viendrait de l'effet orbital induit par le champ magnétique et un effet Hall anormal qui viendrait de l'aimantation induite par le dopage. Cette question est d'autant plus intéressante que l'effet Hall bénéficie depuis peu d'une meilleure compréhension dans le cas de corrélations dans les systèmes à plusieurs bandes [120] et pourrait faire l'objet d'un projet de recherche.

Corrélation et dépendance en température

Les conclusions de la sous-section précédente ont été faites à très basse température ($\beta = 80$). On peut néanmoins étudier la dépendance en température des corrélations électroniques en fonction du régime magnétique du système. La figure 6.3 présente les double occupations à $U = 12$ et à demi-remplissage en fonction de la température pour les trois valeurs de q vues précédemment, c'est-à-dire $q = \infty$, $q = 40$ et $q = 16$. Dans les trois cas, la double occupation sature à basse température et transite vers une valeur asymptotique à haute température. Il existe donc deux régimes de température dans les semi-métaux de Weyl corrélés (avec ou sans champ magnétique) : un régime à basse température où le système est bien décrit par une approche de quasi-particules et un régime à haute température

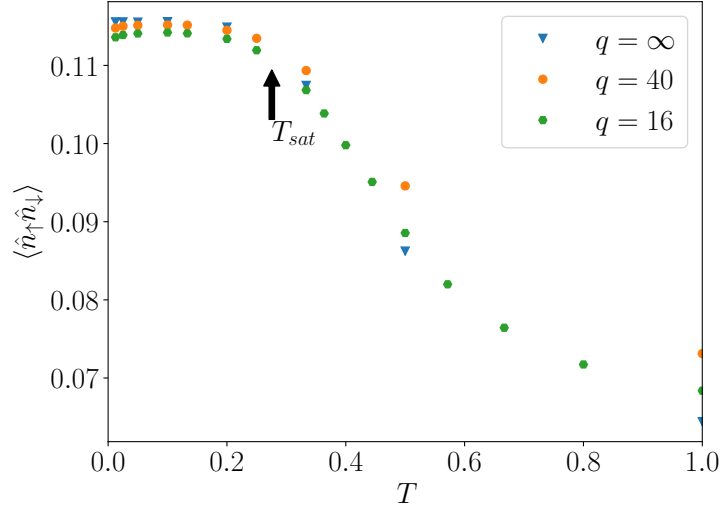


FIGURE 6.3 Double occupation en fonction de la température pour $q = \infty$, $q = 40$ et $q = 16$ à $U = 12$ et à demi-remplissage. Un estimé de la transition entre un semi-métal de Weyl et un mauvais métal est présenté sous la forme de T_{sat} .

où cette approche n'est plus valable et que l'on appellera régime de mauvais semi-métal en référence aux mauvais métaux corrélés [121]. Nous verrons dans la section 6.2.4 les conséquences de ces régimes de température dans la conductivité longitudinale.

Aussi, on définit une température de saturation T_{sat} qui permet de séparer ces deux régimes. Bien entendu, cette température de séparation n'est qu'un estimé de la température à laquelle un semi-métal de Weyl bascule d'un régime à un autre et on la définit arbitrairement comme la température à laquelle la double occupation atteint 95% de sa valeur à basse température. Ce changement de régime peut aussi se voir dans le poids de quasi-particules. Malheureusement, le calcul de ce poids à haute température repose sur un prolongement analytique qui peut être hasardeux et qui peut donner des valeurs non physiques. C'est entre autre pour cela que l'on s'est concentré sur la double occupation. En diagonalisation exacte, cette dernière se calcule en utilisant directement les fonctions d'onde et offre plus de fiabilité pour les interprétations physiques.

6.2 Magnétorésistance négative

Sans rentrer dans des calculs poussés, il apparaît clairement que notre modèle exhibe une magnéto-conductivité positive lorsque l'on lui applique un champ magnétique externe à demi-rempli. En effet, en comparant les densités d'états locales avec et sans champ magnétique externe, on s'aperçoit qu'une densité d'états finie au niveau de Fermi apparaît en présence d'un champ magnétique. Une conséquence directe de cela est que le système pourra exhiber une conductivité de Drude [96]. On peut aussi simplement affirmer que le poids de Drude sera intimement lié à

l'amplitude du champ magnétique puisque la densité d'états au niveau de Fermi y est directement proportionnelle. Ces intuitions sont confirmées par des calculs bien plus rigoureux présentés dans cette section.

6.2.1 Définitions mathématiques

Introduisons tout d'abord les outils mathématiques qui nous seront utiles pour la suite de ce chapitre. Pour calculer la conductivité optique le long de l'axe z , c'est-à-dire dans la même direction que le champ magnétique appliqué, on peut d'abord s'intéresser à la fonction de corrélation courant-courant. Cette fonction a pour définition mathématique en fréquences de Matsubara bosoniques [82, 120] :

$$\Pi_{zz}(i\nu_n) = - \overbrace{\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_m} \text{Tr} [\mathbf{a}_{zz}(\mathbf{k}) \mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_m)]}^{\text{Terme diamagnétique}} \quad (6.9)$$

$$- \underbrace{\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_m} \text{Tr} [\mathbf{v}_z(\mathbf{k}) \mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_m + i\nu_n) \mathbf{v}_z(\mathbf{k}) \mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_m)]}_{\text{Terme paramagnétique}} \quad (6.10)$$

avec $\mathbf{a}_{zz} = \partial_{k_z}^2 \mathbf{H}_0$. On a aussi utilisé les mêmes notations ainsi que les mêmes hypothèses que dans la section 4.1. Ainsi, cette fonction de corrélations courant-courant se compose de deux parties : un terme diamagnétique Π^{Dia} et un terme paramagnétique Π^{Para} . Ces deux termes s'annulent parfaitement à $i\nu_n = 0$. On peut prouver cela en intégrant par partie le terme paramagnétique ou par des arguments d'invariance de jauge sur la conductivité.

A partir de Π_{zz} , on peut obtenir la partie réelle de la conductivité longitudinale en effectuant un prolongement analytique et en utilisant la définition de la conductivité longitudinale :

$$\sigma'_{zz}(\omega) = \frac{\Pi''_{zz}(\omega)}{\omega}. \quad (6.11)$$

Cette formule, bien que simple à calculer lorsque l'on a déjà accès à la fonction de corrélations, nécessite un prolongement analytique qui peut parfois être hasardeux. On lui préférera la formule de la conductivité calculée directement en fréquences réelles :

$$\sigma'_{zz}(\omega) = \pi \sum_{\mathbf{k}} \int d\epsilon \text{Tr} [\mathbf{v}_z(\mathbf{k}) \mathbf{A}(\mathbf{k}, \epsilon) \mathbf{v}_z(\mathbf{k}) \mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega + \epsilon)] \times \frac{f(\epsilon) - f(\omega + \epsilon)}{\omega}, \quad (6.12)$$

avec \mathbf{A} , la fonction spectrale de notre système et f la distribution de Fermi-Dirac. Cette relation est à prendre avec beaucoup de précaution. Il faut d'abord être certain que la trace dans l'intégrande soit purement réelle sinon d'autres contributions devront être pris en compte pour obtenir σ' . Dans notre modèle sur réseau, cela a toujours été le cas. De plus, la fonction spectrale n'est pas aussi simple à obtenir que dans les systèmes ne brisant pas l'invariance par renversement du temps où elle est

simplement proportionnelle à la partie imaginaire de la fonction de Green (cf. équation 2.5). La façon la plus générale pour obtenir la fonction spectrale est [48] :

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2i\pi} (\mathbf{G}^{\dagger R}(\mathbf{k}, \omega) - \mathbf{G}^R(\mathbf{k}, \omega)). \quad (6.13)$$

6.2.2 Conductivité optique et effet orbital du champ magnétique

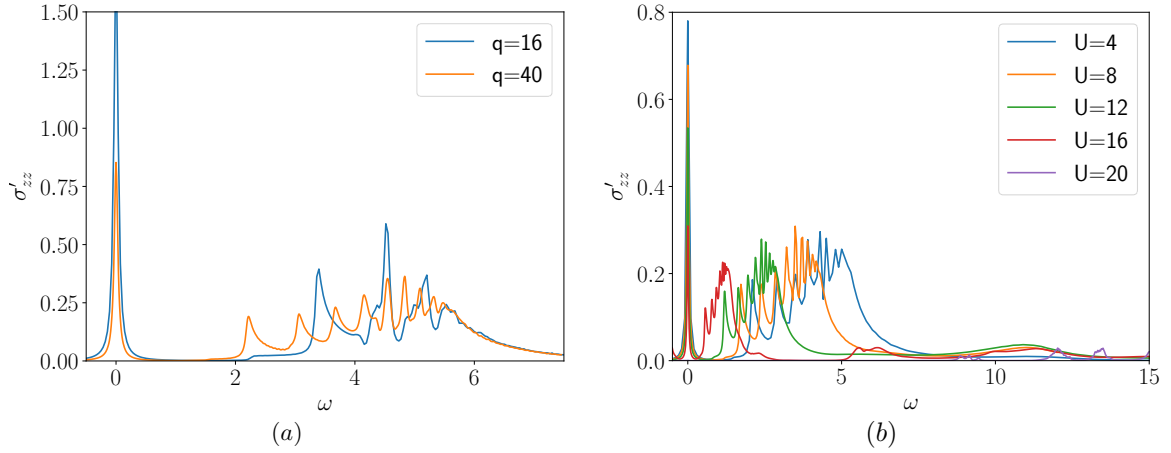


FIGURE 6.4 a) Conductivité optique en fonction des fréquences réelles pour $q = 16$ et $q = 40$ en absence d'interaction. b) Conductivité optique en fonction des fréquences réelles à $q = 40$ et pour différentes valeurs d'interactions U .

Un mot d'abord sur la conductivité optique. La figure 6.4(a) présente les fréquences positives de la conductivité σ_{zz} pour $q = 16$ et $q = 40$ en absence d'interactions. On remarque la présence de deux structures correspondant respectivement au pic de Drude et aux transitions inter-bandes.

Le pic de Drude apparaît à basses fréquence et est une fonction croissante avec le champ magnétique, ainsi lorsque q diminue, la hauteur du pic augmente. Malheureusement, la détermination du pic de Drude à partir de la conductivité optique en fréquences réelles peut être délicate à effectuer dans la pratique. On lui préférera une approche basée sur la fonction de corrélations courant-courant que l'on développe dans la sous-section suivante. Ce pic est isolé en fréquence des autres processus. En effet, des règles de sélection sur les excitations inter-bandes sont présentes dans le système [122] et ne permettent que des excitations entre niveaux de Landau de même indice en valeur absolue. Ainsi, une excitation entre le niveau de Landau $n = -1$ vers le niveau de Landau $n = +1$ est possible alors qu'une excitation entre le niveau de Landau chiral $n = 0$ et le premier niveau de Landau non-chiral $n = 1$ est interdite.

Les excitations à fréquences finies correspondent donc à des excitations entre les niveaux de Landau d'indice négatif vers les niveaux d'indice positif. Ces processus se remarquent aisément par la présence de pics de Landau dont la forme en dent de scie signe le caractère tridimensionnel du système. Ces pics ne sont pas espacés de façon constante pour deux raisons : la première est que la

dispersion linéaire du semi-métal de Weyl entraîne un espacement en \sqrt{B} des pics de Landau et la seconde est que le modèle sur réseau induit forcément une non-linéarité des bandes électronique qui affectera la position des niveaux de Landau.

On peut quand même se faire une première idée qualitative de l'effet des interactions sur la conductivité optique σ_{zz} en examinant la figure 6.4(b). Lorsque les corrélations augmentent, le pic de Drude diminue et on assiste à un rapprochement ainsi qu'un rétrécissement de la structure correspondant aux transitions inter-bandes. En plus de ces deux propriétés induites par les excitations cohérentes de quasi-particules, la présence des bandes de Hubbard lorsque U est suffisamment élevé permet d'avoir deux nouvelles excitations possibles : une transition entre la bande inférieure d'Hubbard et les pics de quasi-particules ainsi qu'une transition entre les deux bandes d'Hubbard. Les ordres de grandeur en énergie de ces deux transitions sont respectivement $U/2$ et U . Une de ces transitions se remarque dans la figure grâce au renflement vers $\omega \approx 10$, mais l'utilisation d'un solveur d'impureté basé sur la diagonalisation exacte limite l'étude de ces transitions. En effet, le faible nombre de sites de bain empêche d'avoir une représentation fidèle des bandes de Hubbard. Nous avons déjà abordé le sujet avec l'apparente présence d'une nouvelle paire de bande d'Hubbard qui n'est qu'un artefact de la méthode.

Enfin, lorsque le système est dans une phase de Mott, on retrouve un gap dans la conductivité optique ce qui est cohérent avec l'image que l'on a d'un isolant.

6.2.3 Renormalisation du pic de Drude

Lorsque l'on calcule la fonction de corrélation courant-courant, on remarque la présence d'un *saut* entre la fréquence de Matsubara égale à zéro et la première non nulle (cf. figure 6.5(a)). Il s'agit la précisément de la présence d'un pic de Drude dans la conductivité. En effet, en l'absence d'interactions, on peut diviser les contributions à la fonction de corrélation en deux parties distinctes : les contributions intra-bandes et les contributions inter-bandes. Les premières apparaissent directement à fréquences nulles alors que les secondes nécessitent des excitations d'énergie finie et donc apparaissent à des fréquences finies. Cette explication n'est valable qu'en absence d'interaction. En effet, une self-énergie qui dépend des fréquences réelles entraîne un élargissement du pic de Drude, ce qui se manifeste aussi dans la fonction de corrélation courant-courant.

On peut néanmoins utiliser à notre avantage la fantastique robustesse des propriétés des quasi-particules dans les semi-métaux de Weyl (avec ou sans champ magnétique) pour calculer simplement le poids de Drude. En effet, la présence d'un pic de Drude et de transitions inter-bandes nous permet de réécrire la conductivité longitudinale comme suit :

$$\sigma'_{zz} = \sigma_{zz}^D + \sigma_{zz}^{inter}. \quad (6.14)$$

On a ici seulement divisé les contributions intra-bandes et inter-bandes de la conductivité. En utilisant

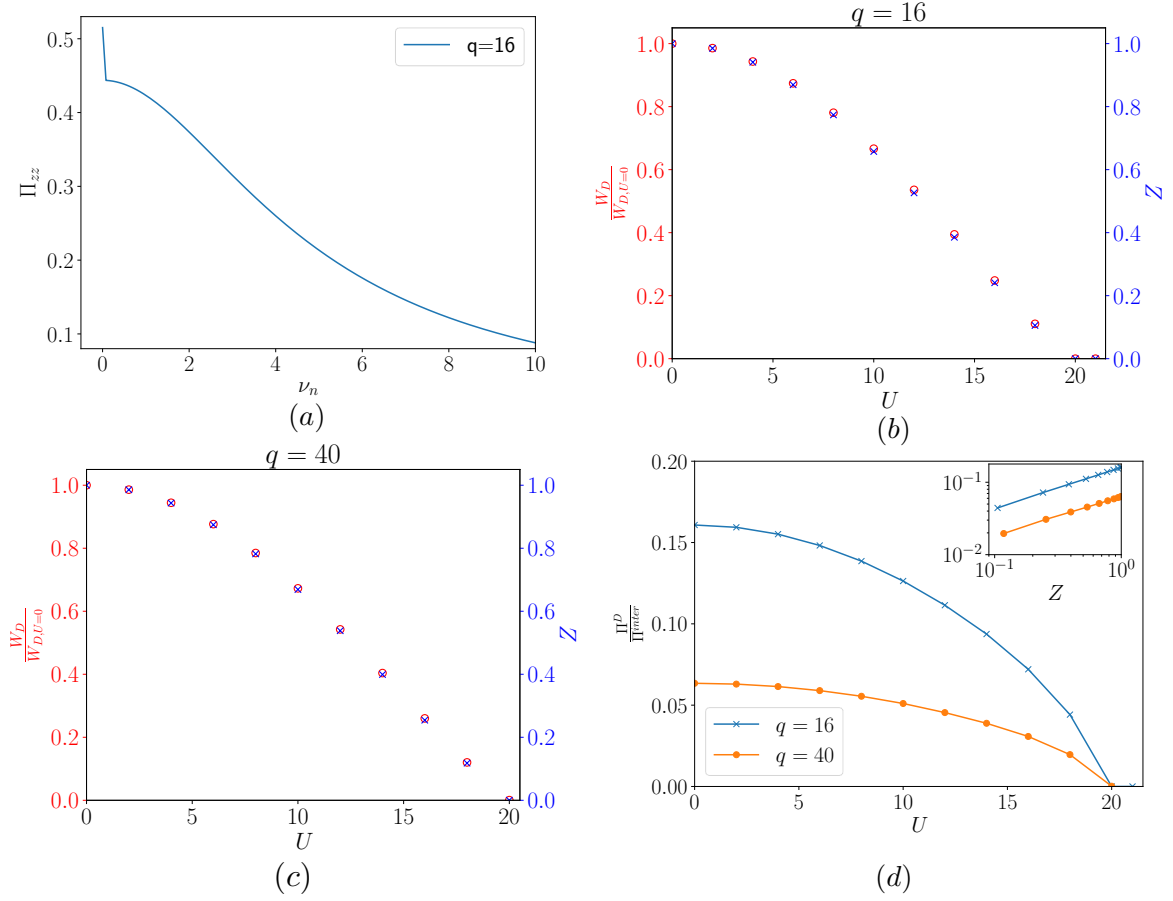


FIGURE 6.5 a) Fonction de corrélation courant-courant en fonction des fréquences de Matsubara bosoniques positives à $q = 16$ et à $\beta = 80$. La discontinuité qui apparaît à $\nu_n = 0$ est due à la présence d'un pic de Drude. b) Poids de Drude normalisé (cercles rouges) ainsi que le poids de quasi-particules (croix bleues) en fonction du terme d'Hubbard U pour $q = 16$ et $\beta = 80$. c) Même figure que la figure 6.5 pour $q = 40$. d) Rapport entre le poids de Drude et le poids des excitations inter-bandes en fonction de U pour $q = 16$ et $q = 40$ à $\beta = 80$. Le panneau représente ce même rapport en fonction du poids de quasi-particules Z sur une échelle log-log. La pente de cette figure log-log vaut environ 1/2.

la règle de somme partielle (aussi appelée règle de somme f) [123], on peut écrire :

$$\int d\omega \sigma'_{zz}(\omega) = \int d\omega \sigma_{zz}^D(\omega) + \int d\omega \sigma_{zz}^{inter}(\omega) = \pi \Pi^{Dia}. \quad (6.15)$$

Comme dans la fonction de corrélation courant-courant exprimée en fréquences de Matsubara, les contributions intra-bandes sont limités à la seule fréquence zéro et les contributions inter-bandes aux fréquences finies, on peut faire une extrapolation polynomiale à fréquence nulle des valeurs inter-bandes de la fonction de corrélation et obtenir le poids de Drude en faisant la différence entre le terme diamagnétique et l'extrapolation des contributions inter-bandes. Cette approche est rendue possible grâce à la faible dépendance en fréquence de la self-énergie qui limite l'élargissement en

fréquences du pic de Drude. De plus, les valeurs du poids de Drude obtenues à partir de cette méthode ont été comparées avec d'autres approches et ont toujours été quantitativement similaires.

Avec cette méthode de quantification du poids de Drude, on est capable de suivre l'évolution de ce dernier en fonction du champ magnétique. Ainsi, pour les valeurs de q testés ($q \in [16, 100]$), le poids de Drude augmente linéairement avec B . Cela nous indique que ce sont essentiellement les niveaux de Landau chiraux qui contribuent au pic de Drude [29]. Lorsque l'on compare le poids de Drude normalisé par sa valeur à $U = 0$ avec le poids de quasi-particules, on remarque grâce aux figures 6.5(b) et 6.5(c) que ces deux quantités sont numériquement égales sur toutes les valeurs d'interaction comparées, et ce, quelque soit la valeur du champ magnétique. Ce résultat indique donc qu'une approche de quasi-particules est parfaitement adaptée pour rendre compte du transport dc dans les semi-métaux de Weyl soumis à un champ magnétique à basse température.

On peut aussi évaluer rapport entre le poids de Drude et les poids des processus inter-bandes dans la règle de somme f. L'intérêt de ce rapport est qu'il fait intervenir l'intégrale de la conductivité optique sur l'ensemble des fréquences réelles et donc, lorsque U est suffisamment fort, il fait intervenir des transitions entre les bandes d'Hubbard qui ne sont pas pris en compte dans l'approche des quasi-particules. Ainsi, la formule suivante :

$$\frac{\Pi_{zz}^D}{\Pi^{inter}} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sigma^D(\omega)}{\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sigma^{inter}(\omega)} \quad (6.16)$$

est tracée en fonction de U pour $q = 16$ et $q = 40$ dans la figure 6.5(d). Une étude approfondie de la dépendance en Z de cette quantité permet de déterminer que le rapport entre le poids de Drude et le poids des processus inter-bande est une fonction de $Z^{\frac{1}{2}}$ comme le montre le panneau de la figure 6.5(d). Ce dernier représente le rapport en fonction du poids de quasi-particule sur une échelle log-log et exhibe un comportement linéaire de pente 1/2 pour les deux valeurs de q à faible interaction U . Dans le régime des fortes corrélations, une déviation apparaît par rapport à la valeur de la pente dans le régime des faibles corrélations. Cette déviation est attendue puisque les propriétés thermodynamique à fréquence finie sont sensibles aux propriétés dynamique de la self-énergies, propriétés qui ne sont pas négligeable lorsque U est suffisamment grand. On peut par conséquent conclure que si le pic de Drude voit son poids diminuer en Z , les processus inter-bandes sont moins affectés par les corrélations et voient leur poids diminuer en $Z^{\frac{1}{2}}$.

6.2.4 Dépendance en température et changement de comportement

Nous avons vu dans la sous-section 6.1.2 qu'un semi-métal de Weyl avec interaction exhibe deux régimes de température différents. Dans le cas de métaux corrélés, cette transition d'un régime à un autre est visible dans les propriétés de transport [121] notamment dans la conductivité optique. Ainsi en augmentant la température, on peut voir de bon métaux corrélés qui conduisent bien les courants électriques devenir ce que l'on appelle des mauvais métaux, c'est-à-dire des mauvais conducteurs de courant.

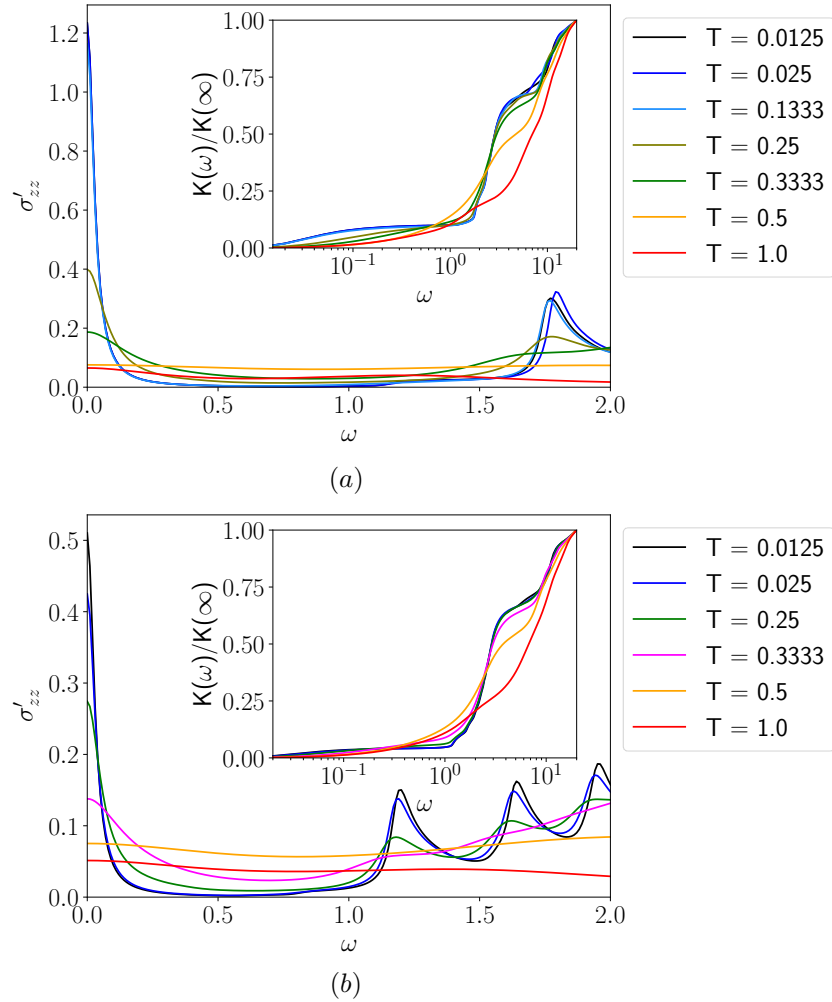


FIGURE 6.6 a) Conductivité optique en fonction des fréquences réelles pour $q = 16$ et $U = 12$ à différentes températures T . On remarque l'élargissement du pic de Drude ainsi que sa diminution progressive. Dans le panneau de la figure, l'intégrale de la conductivité jusqu'à la fréquence ω est représentée dans une échelle semi-log. b) Même figure que (a) pour $q = 40$. Dans les deux panneaux, à très basse température, la dépendance en fréquence de l'intégrale est grossièrement composée de trois parties : la contribution du poids de Drude pour les premières fréquences, les contributions des processus inter-bandes pour des fréquences intermédiaires et les contributions des transitions faisant intervenir les bandes de Hubbard pour les hautes fréquences.

Dans un semi-métal de Weyl, le champ magnétique est un excellent outil pour étudier la transition entre les deux régimes de température puisque, soumis à un champ magnétique, le semi-métal acquiert un comportement métallique. Ainsi, les figures 6.6 (a) et (b) représentent la conductivité optique longitudinale pour $q = 40$ et $q = 16$ respectivement en fonction des fréquences réelles à différentes températures pour $U = 12$. La transition entre un bon et un mauvais métal est clairement visible dans l'étalement de la conductivité à basses fréquences. Une autre façon de vérifier cette

transition est de calculer la quantité suivante :

$$K(\omega) = \int_0^\omega d\tilde{\omega} \sigma'_{zz}(\tilde{\omega}) \quad (6.17)$$

c'est-à-dire l'intégrale de la conductivité optique jusqu'à la fréquence ω . Cette quantité est représentée dans les panneaux des figure 6.6 (a) et (b) en échelle semi-log. A très basse température, la dépendance en fréquence de cette intégrale est grossièrement composée de trois parties : la contribution du poids de Drude pour les premières fréquences, les contributions des processus inter-bandes pour des fréquences intermédiaires et les contributions des transitions faisant intervenir les bandes de Hubbard pour les hautes fréquences. Lorsque la température augmente, l'étalement du pic de Drude conduit à une fusion de ce dernier avec les processus inter-bandes et seule la dernière partie de l'intégrale 6.17 reste bien différenciée. De plus, ce changement de comportement a lieu à une température du même ordre de grandeur que notre estimé T_{sat} .

6.3 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons étudié différentes propriétés des semi-métaux de Weyl soumis à un champ magnétique uniforme et statique.

Le modèle sur réseau utilisé exhibe les propriétés attendues d'un semi-métal de Weyl sous champ magnétique, à savoir des niveaux de Landau chiraux ainsi que des niveaux de Landau non chiraux correspondant à des bandes électroniques linéaires à proximité de ces premiers.

Grâce à la DMFT et à sa généralisation pour tenir compte de l'effet orbital, nous sommes en mesure de résoudre le problème des semi-métaux de Weyl avec interaction d'Hubbard et sous champ magnétique. Malgré des effets minimes sur la self-énergie, les conséquences de l'effet orbital sont visibles dans la limite quantique, c'est-à-dire dans la limite à fort champ magnétique où les niveaux chiraux sont suffisamment espacés des premiers niveaux non chiraux. Loin du demi-remplissage, le fait que les niveaux chiraux ne contribuent pas à l'ensemble des densités d'états partielles entraîne un déséquilibre dans les densités électroniques de chaque espèce de spin. En plus d'induire une aimantation de spin, ce déséquilibre a des conséquences sur la self-énergie et notamment sur sa partie réelle. De façon surprenante et un peu en désaccord avec les résultats obtenus avec le modèle sur réseau avec un terme Zeeman, il n'entraîne pas de mouvements significatifs des niveaux de Landau chiraux dans l'espace réciproque. Enfin, l'étude de la double occupation en fonction de la température permet de mettre en évidence deux régimes de température différents dans les semi-métaux de Weyl. Le premier régime à basse température est caractérisé par la validité de l'approche des quasi-particules alors que le second régime, à haute température, est comparable au régime de mauvais métaux que l'on retrouve dans les métaux corrélés.

Le modèle sur réseau nous permet aussi de calculer des propriétés de transport telle que la conductivité optique longitudinale le long de l'axe du champ magnétique. En l'absence d'interaction,

cette conductivité est caractérisée par la présence d'un pic de Drude à basses fréquences et d'excitations inter-bandes à fréquences finies. Lorsque l'on rajoute les interactions à basse température, le pic de Drude diminue en amplitude et les excitations inter-bandes apparaissent à des fréquences plus basses du fait de la renormalisation des bandes électroniques due au poids de quasi-particules. De plus, on voit aussi l'apparition de nouvelles transitions comme des transitions entre la bande inférieure d'Hubbard et les excitations de quasi-particules ou des transitions entre les deux bandes d'Hubbard. Une étude approfondie du poids de Drude en fonction des interactions prouve que son évolution est guidée par le poids de quasi-particules alors que l'évolution du poids des transitions inter-bandes semble être sensible à la racine carré du poids de quasi-particules.

Enfin, la transition entre un bon et un mauvais métal est aussi visible dans la conductivité optique. Lorsque la température augmente, le pic de Drude subit un élargissement en fréquence qui finira par le faire fusionner avec les transitions inter-bandes. Bien que mesurable, il est plus difficile de repérer précisément la température de saturation à partir de la conductivité optique.

Conclusion

Les objectifs de la thèse ont conduit à la séparation de ce travail en deux grandes parties qui se basent sur un socle commun : la théorie du champ moyen dynamique appliquée aux semi-métaux de Weyl. Ainsi, la première partie a pour objectif de répondre à la question ouverte : **comment aborder les semi-métaux de Weyl avec des interactions d'Hubbard ?**

Dans le paradigme de la théorie du champ moyen dynamique, cette question a une réponse simple : il faut les considérer comme des matériaux peu corrélés. En effet, à largeur de bande égale, un semi-métal de Weyl verra les corrélations électroniques moins affecter ses propriétés intrinsèques qu'un métal. Une approche perturbative du problème d'impureté quantique à la base de la théorie de champ moyen dynamique révèle que le temps de vie des quasi-particules est extrêmement grand. Alors que dans un métal, cette théorie modélise parfaitement une phase de liquide de Fermi avec un temps de vie de quasi-particules qui se comporte comme l'inverse du carré de la fréquence ω^{-2} , dans les semi-métaux de Weyl, ce même temps de vie se comporte comme ω^{-8} . Cette explication permet de comprendre l'extraordinaire robustesse des propriétés de quasi-particules dans ces semi-métaux. De plus, les propriétés comme le changement de position des nœuds de Weyl dans la zone de Brillouin sont visibles par des méthodes comme un simple champ moyen à la *Hartree-Fock*. Ce mouvement n'est pas une propriété intrinsèque aux semi-métaux de Weyl et il faut généralement briser des symétries du réseaux pour permettre ce mouvement.

Pourtant, il serait absurde de faire l'impasse sur une prise en compte fidèle des corrélations électroniques puisque ces dernières ont un impact sur des propriétés mesurables comme les propriétés de transport ou l'aimantation. Nous avons donc étudié l'effet Hall anormal et l'aimantation orbitale dans un modèle de semi-métal de Weyl brisant la symétrie par renversement du temps. Ainsi, les interactions augmentent les propriétés topologiques comme la conductivité anormale de Hall intrinsèque. Cette augmentation s'effectue grâce à une renormalisation des propriétés microscopiques du système du fait des interactions et qui est essentiellement décrite par le biais des diagrammes Hartree-Fock. La destinée de propriétés non protégées topologiquement peut être subtile à prédire si on ne modélise pas correctement les interactions. Ainsi, l'aimantation orbitale se voit être l'objet d'une compétition entre deux mécanismes aux conséquences opposées. L'augmentation de l'effet Hall anormal conduit à augmenter la valeur de l'aimantation orbitale alors que la localisation des électrons, à cause des corrélations électroniques, tend à la diminuer. Dans le régime des corrélations faibles et modérées, cette compétition aboutie à un quasi match nul et l'aimantation ne voit pas sa

valeur foncièrement changée. A forte corrélation, c'est la localisation des particules qui triomphe de la topologie.

La question qui résume la seconde partie de cette thèse est : **comment aborder les semi-métaux de Weyl soumis à un champ magnétique externe et avec des interactions de type Hubbard ?** Pour répondre à cette question, nous avons dans un premier temps prouvé la validité de la théorie du champ moyen dynamique en présence d'un effet orbital induit par un champ magnétique externe. Cette démonstration justifie l'application de cette théorie sur n'importe quel système soumis à un champ magnétique externe. Elle permet donc d'avoir en main une méthode non perturbative qui prend en compte les effets du champ magnétique à tous les ordres dans la self-énergie. Nous avons appliqué la théorie du champ moyen dynamique pour un réseau carré soumis à un champ magnétique statique et uniforme en utilisant la théorie de la perturbation itérée comme solutionneur d'impureté. Ainsi, la renormalisation de la pulsation cyclotron du fait du changement de la masse effective des quasi-particules ainsi que l'effet Shubnikov-de Haas sont capturés par la méthode. De plus, sa facilité d'utilisation indépendamment de l'intensité du champ magnétique permet d'étudier la transition entre le régime régi par les niveaux de Landau et le régime où le papillon d'Hofstadter est visible. Cette transition est notamment visible dans le temps de vie des quasi-particules.

Avec la certitude que la théorie du champ moyen dynamique soit applicable sur les semi-métaux de Weyl soumis à un champ magnétique, nous pouvons répondre à la question soulevée dans cette seconde partie. A basse température, les propriétés sensibles aux corrélations comme le poids de quasi-particules ou la double occupation ne sont pas vraiment affectées par la présence d'un champ magnétique et les conclusions de la partie précédente sont applicables. Des différences majeures peuvent apparaître. Loin du demi-remplissage, la légère aimantation de spins qu'induisent les niveaux de Landau chiraux a des conséquences importantes sur la self-énergie. De façon assez surprenante, la position des niveaux de Landau n'est pas vraiment affectée par la combinaison d'une aimantation de spins et de corrélations électroniques alors que c'est le cas en absence de champ magnétique. De plus, notre modèle sur réseau exhibe une magnétoconductivité positive due à la présence de niveaux de Landau chiraux. Ce pic de Drude voit son poids diminuer avec l'augmentation des corrélations électroniques et cette diminution est totalement commandée par le poids de quasi-particule, Z .

L'étude en température de la double occupation permet de mettre en évidence la présence de deux régimes thermiques dans les semi-métaux de Weyl corrélés. On peut les rapprocher aux régimes en température qui existent dans les métaux corrélés : à basse température, le semi-métal de Weyl interagissant est parfaitement modélisé par une approche de quasi-particules et à haute température le système se comporte comme un mauvais métal. Cette distinction se vérifie aussi dans les propriétés de transport comme la conductivité optique. Ainsi, à mesure que la température augmente, le semi-métal de Weyl sous champ magnétique devient de moins en moins bon conducteur.

Il existe encore de nombreuses voies de recherche pour les semi-métaux de Weyl corrélés. Un premier projet de recherche rapide serait de vérifier l'effet Hall dans les semi-métaux de Weyl soumis à un champ magnétique. En effet, le formalisme prenant en compte de façon rigoureuse les corrélations électroniques dans des systèmes à plusieurs bandes a été défini récemment et ne demande qu'à être

appliqué aux semi-métaux de Weyl. De plus, ce projet permettra de répondre à la question déjà posée dans le chapitre 6 : un effet Hall anormal intrinsèque existe-t-il dans un semi-métal de Weyl dopé et soumis à un champ magnétique externe ?

Après avoir étudié l'effet d'une interaction de type Hubbard, il serait intéressant de regarder l'effet d'une interaction de type Hubbard étendue qui rajoute un terme d'interaction électron-électron V sur les électrons situés sur des sites premiers voisins. Ce type d'interaction étendue devrait avoir des conséquences profondes dans les semi-métaux de Weyl puisque les études sur des semi-métaux de Weyl avec des interactions coulombienne à longue portée ont déjà révélé d'intéressantes phases exotiques comme par exemple une phase de liquide de Fermi marginal lorsque le potentiel chimique se trouve aux niveaux des nœuds de Weyl. De plus, une théorie de champ moyen dynamique étendue existe pour prendre en compte ce type d'interaction. Quels sont les effets de V sur la position des nœuds de Weyl ? Peut-on obtenir une phase de liquide de Fermi marginal avec cette approche et quelles sont les conséquences sur les propriétés de transport, notamment en fonction de la température ? Voici quelques questions ouvertes qui mériteraient d'avoir une réponse.

Annexe A

Calculs diagrammatiques

Dans cette annexe, nous présenterons des calculs utilisés dans cette thèse. Plus précisément, nous calculons la fonction de Green d'une impureté non-intéragissante couplée à un bain d'électron ainsi que le diagramme au second ordre de la Self-energie. Ce chapitre ne prétendant pas faire un rappel des diagrammes de Feynman, le lecteur pourra se référer aux chapitre 2 et 3 du livre *Many-Particle Physics* de Mahan [82] pour de plus amples informations.

A.1 Fonction de Green libre d'une impureté libre couplée à un bain

En utilisant la notation du chapitre 2, l'Hamiltonien de départ s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{hyb}. \quad (\text{A.1})$$

Pour trouver la fonction de Green de l'impureté $G_d(\tau) = -\langle T_\tau d(\tau) d^\dagger(0) \rangle$, nous allons utiliser le couplage H_{hyb} comme la partie perturbative. Comme il ne s'agit pas d'une interaction à deux corps, seuls des diagrammes linéaires seront utilisés. la fonction de Green de l'impureté sans couplage avec le bain est :

$$G_d^0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_f}, \quad (\text{A.2})$$

que l'on représentera avec la patte dans la figure A.1(a). Comme l'Hamiltonien de couplage "transforme" un électron dans l'état $|d\rangle$ à un autre de l'état $|c_k\rangle$, le vertex contiendra la patte de la figure A.1(b). Enfin comme on cherche la fonction de Green de l'impureté, on doit avoir que les pattes externes des vertex soient G_d^0 . L'ensemble de ces conditions nous donnent la première contribution non nulle représentée dans la figure A.1(c).

En appliquant les règles de Feynman, il apparaît que la somme de l'ensemble des contributions donnent la formule mathématique suivante :

$$G_d(i\omega_n) = G_d^0(i\omega_n) + G_d^0(i\omega_n) \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}} \left(V_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} V_{\mathbf{k}}^* G_d^0(i\omega_n) \right)^n \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{G_d^0(i\omega_n)}{1 - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} G_d^0(i\omega_n)} \quad (\text{A.4})$$

$$= \frac{1}{G_d^{-1,0}(i\omega_n) - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}}}, \quad (\text{A.5})$$

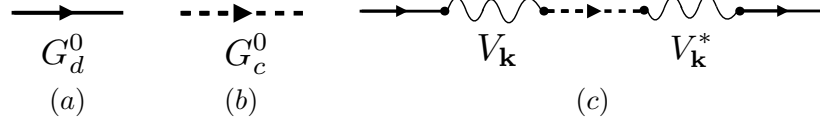


FIGURE A.1 Représentation diagrammatique de (a) la fonction de Green de l'impureté lorsqu'il n'y a pas de couplage avec le bain. (b) la fonction de Green d'un état du bain lorsque le couplage n'est pas présent. (c) Première contribution non nulle de l'effet de l'hybridation sur la fonction de Green de l'impureté.

que l'on a représenté graphiquement dans la figure A.2. On retrouve finalement la fameuse expression que l'on avait déjà rencontré l'équation 2.57 :

$$G_d(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_f - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}}}. \quad (\text{A.6})$$

Il faut noter que la sommation de tout les diagrammes de Feynman fait que cette fonction de Green est exacte et peut être utilisée comme fonction de Green libre de l'impureté lorsque l'on fera des calculs perturbatifs sur l'impureté.

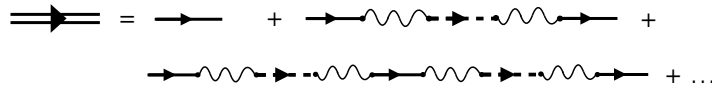


FIGURE A.2 Diagramme de Feynman total de la fonction de Green d'une impureté non interagissante couplée à un bain. La patte à la double ligne représente la fonction de Green avec l'Hybridation. On remarque que les vertex apparaissent deux fois : Une fois pour emmener un électron du site vers le bain et une autre fois pour le processus contraire.

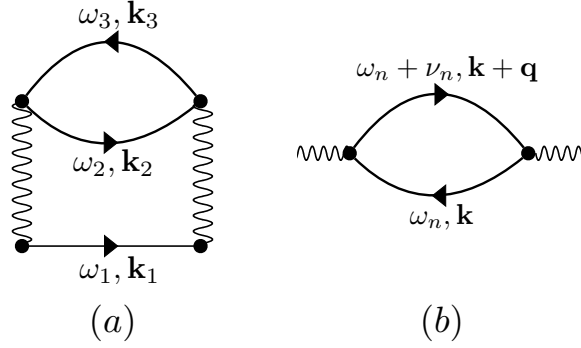


FIGURE A.3 a) Diagramme de Feynman représentant le développement à l'ordre deux en U de la self-énergie. b) Diagramme de Feynman communément appelé diagramme à bulle. Il représente généralement les fonctions de corrélation densité-densité.

A.2 Perturbation au second ordre dans le modèle de Hubbard :

Dans l'ensemble des travaux présentés dans cette thèse, le diagramme présenté figure A.3(a) a une importance assez particulière. Il permet de vérifier certains résultats de la DMFT à peu de coût numérique et est à la base du solveur d'impureté IPT. De plus, comme il s'agit du premier diagramme de Feynman à exhiber une dépendance fréquentielle, sa résolution permet de calculer les temps de demi-vie des électrons lorsque les corrélations sont faibles. Bien que dériver la dépendance en ω^2 dans le cas d'un liquide de Fermi fasse partie des exercices classiques des problèmes à N-corps, nous ne l'aborderons pas ici (Pour cela, se référer au chapitre 6 du livre [124]). Nous privilégierons plutôt une dérivation des formules utilisées dans la section 2.5 et la sous-section 4.1.4

Nous supposons que l'invariance par translation est présente dans le système. Appliquer les règles de Feynman sur le diagramme présenté dans la figure A.3 nous donne l'expression suivante :

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{U^2}{\beta^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \omega_1} \sum_{\mathbf{k}_2, \omega_2} G_{\sigma}(\mathbf{k}_1, \omega_1) G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_2, \omega_2) G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_3, \omega_3). \quad (\text{A.7})$$

Les lois de conservations qui s'appliquent aux nœuds du diagramme nous renseignent sur le lien les moments et les fréquences de Matsubara en jeu dans l'expression A.7. Nous avons donc : $\mathbf{k} + \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ et $\omega_n + \omega_3 = \omega_1 + \omega_2$. On peut alors isoler la partie correspondant à la "bulle" dans le diagramme (cf. Figure A.3 (b)) :

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{U^2}{\beta^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \omega_1} G_{\sigma}(\mathbf{k}_1, \omega_1) \sum_{\mathbf{k}_2, \omega_2} G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_2, \omega_2) G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}, \omega_2 + \omega_1 - \omega_n). \quad (\text{A.8})$$

En réécrivant $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}$ et $\nu_n = \omega_1 - \omega_n$, on reconnait un produit de convolution :

$$F_{\bar{\sigma}}(\mathbf{q}, \nu_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}_2, \omega_2} G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_2, \omega_2) G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \omega_2 + \nu_n) \quad (\text{A.9})$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}_2, \omega_2} \iint d\mathbf{r} d\tilde{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r} + \tilde{\mathbf{r}})} e^{-i\mathbf{q} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, \omega_2) G_{\bar{\sigma}}(\tilde{\mathbf{r}}, \omega_2 + \nu_n) \quad (\text{A.10})$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_2} \iint d\mathbf{r} d\tilde{\mathbf{r}} G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, \omega_2) G_{\bar{\sigma}}(\tilde{\mathbf{r}}, \omega_2 + \nu_n) \sum_{\mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r} + \tilde{\mathbf{r}})} e^{-i\mathbf{q} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_2} \iint d\mathbf{r} d\tilde{\mathbf{r}} G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, \omega_2) G_{\bar{\sigma}}(\tilde{\mathbf{r}}, \omega_2 + \nu_n) \delta(\mathbf{r} + \tilde{\mathbf{r}}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \quad (\text{A.12})$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_2} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} G_{\bar{\sigma}}(-\mathbf{r}, \omega_2) G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, \omega_2 + \nu_n). \quad (\text{A.13})$$

De même pour la somme sur les fréquences de Matsubara, on obtient finalement :

$$F_{\bar{\sigma}}(\mathbf{q}, \nu_n) = \int d\mathbf{r} \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{i\nu_n \tau} G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, \tau) G_{\bar{\sigma}}(-\mathbf{r}, -\tau) \quad (\text{A.14})$$

$$= \int d\mathbf{r} \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{i\nu_n \tau} F(\mathbf{r}, \tau). \quad (\text{A.15})$$

Si cette dérivation ne change rien à la complexité du calcul du diagramme, il pointe du doigt un aspect numérique intéressant. Pour calculer le diagramme à bulle, il suffit de faire la transformée de Fourier inverse de la fonction de corrélation $F(\mathbf{r}, \tau)$. L'utilisation de transformées de Fourier rapides (FFT, *fast Fourier transform*) sera donc particulièrement utile pour réduire le temps de calcul numérique. Continuons notre dérivation à partir de :

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{U^2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}_1, \omega_1} G_{\sigma}(\mathbf{k}_1, \omega_1) F_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}, \omega_1 - \omega_n). \quad (\text{A.16})$$

L'application directe du théorème sur les produits de convolution nous donne :

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{U^2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}_1, \omega_1} G_{\sigma}(\mathbf{k}_1, \omega_1) F_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}, \omega_1 - \omega_n) \quad (\text{A.17})$$

$$= -U^2 \int d\mathbf{r} \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\omega_n \tau} G_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) F_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, \tau) \quad (\text{A.18})$$

$$= -U^2 \int d\mathbf{r} \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\omega_n \tau} G_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) G_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, \tau) G_{\bar{\sigma}}(-\mathbf{r}, -\tau). \quad (\text{A.19})$$

Prenons le temps de calculer combien de puissance de calcul est nécessaire pour obtenir un point (\mathbf{k}, ω_n) du terme $\Sigma^{(2)}$. Si on attaque la formule A.7 en dimension trois par l'approche de la force brute, on devra faire face à un problème de complexité $\mathcal{O}(N_k^6 \times N_\omega^2)$ où N_k est le nombre de point dans une direction de la zone de Brillouin et N_ω , le nombre de fréquences de Matsubara utilisées.

Cette complexité passe à $\mathcal{O}(N_k^3 \times N_\omega \times \log(N_k \times N_\omega))$ ¹ pour obtenir l'ensemble points (\mathbf{k}, ω_n) en passant par une FFT.

On peut maintenant plus facilement comprendre d'où vient l'expression de $\tilde{\Sigma}_\sigma^{(2)}$ dans le solveur IPT puisqu'il s'agit simplement de la fonction A.19 avec la fonction de Green de l'impureté non interagissante de l'équation A.6.

1. Un calcul rapide pour donner un ordre d'idée : en prenant $N_k = 128$ et $N_\omega = 1024$, la complexité de la formule brute pour un point (\mathbf{k}, ω_n) donne 4.6×10^{18} alors que passer par une FFT donne 2.5×10^{10} pour l'ensemble des points (\mathbf{k}, ω_n) . On gagne donc plus de huit ordres de grandeur !

Annexe B

Prolongement analytique par la méthode des approximants de Padé.

Introduction

Cette courte annexe a pour but de présenter la méthode des approximants de Padé pour le prolongement analytique de données numériques [49, 50]. Cette méthode approxime les fonctions en fréquence de Matsubara par des fonctions rationnelles pour ensuite calculer leurs valeurs en fréquences réelles. La stabilité de la méthode des approximants de Padé laisse à désirer dans le sens où de petites erreurs sur les données de départ peuvent conduire à un prolongement analytique non physique. De ce fait, cette approche fonctionne donc optimalement sur des données numériques extrêmement précises ce qui la limite à quelques solveurs d'impureté comme l'IPT et la diagonalisation exacte. Pour des solveurs d'impureté basés sur des approches stochastiques, on lui préférera des méthodes moins sensibles aux erreurs comme la méthode du maximum d'entropie. Néanmoins, ne laissons pas de côté le grand nombre d'avantages que présente un prolongement analytique par approximants de Padé. L'algorithme est souvent très rapide et peu coûteux d'un point de vue numérique. Il fonctionne sans aucune modification particulière sur des données bosoniques ou fermioniques et ses résultats exhibent souvent plus de détails que ceux obtenus par le biais d'autres méthodes de prolongement analytique.

Dans cette annexe, nous présentons l'algorithme de prolongement analytique par la méthode des approximants de Padé utilisé dans cette thèse. Une introduction mathématique et algorithmique est faite dans la section B.1. Cet algorithme a été adapté en script python et est libre d'utilisation.

B.1 Définition mathématique et algorithme

Un approximant de Padé est une fonction rationnelle, c'est-à-dire une fonction qui peut s'écrire comme le rapport de deux polynômes. De façon générale, l'approximant de Padé est défini par deux entiers positifs (M, N) caractérisant les degrés de polynôme des numérateur et dénominateur, respectivement :

$$F_{M,N}(z) = \frac{P_M(z)}{Q_N(z)} \quad (\text{B.1})$$

où $z \in \mathbb{C}$ et dans la suite de cette section, on prendra $M = N$. L'utilisation de fonctions rationnelles pour approximer des fonctions de problème à N-corps comme les fonctions de Green est une bien meilleure approche que l'utilisation de fonctions polynomiales comme dans un développement de Taylor. En effet, les fonctions physiques ont généralement une limite asymptotique bien définie et l'utilisation d'un polynôme conduira forcément à une limite infinie dans la limite asymptotique. Pour rendre compte de l'algorithme de la méthode de prolongement analytique, on peut réécrire l'équation B.1 sous la forme d'une fraction continue :

$$F_{N,N}(z) = \frac{a_0}{1 + \frac{a_1(z - z_1)}{1 + \frac{a_2(z - z_2)}{\ddots \frac{1}{1 + a_N(z - z_N)}}}} \quad (\text{B.2})$$

avec z_i , les fréquences des données numériques. Cette forme est le point de départ de l'algorithme utilisé pour le prolongement analytique par approximants de Padé. Il faut cependant noter qu'il n'existe pas un unique algorithme lorsque l'on parle de méthode d'approximants de Padé mais qu'une multitude d'approches existe.

Le but du prolongement est donc de déterminer les coefficients a_i adéquats. Pour ce faire, nous le faisons de façon récursive. Essayons simplement de déterminer le coefficient a_0 lorsque l'on essaye d'approximer une fonction $f(i\omega_n)$ avec un approximant de Padé. L'expression de $F(i\omega_1)$ en fraction continue est :

$$F(i\omega_1) = \frac{a_0}{1 + \frac{a_1(i\omega_1 - i\omega_1)}{1 + \frac{a_2(i\omega_1 - i\omega_2)}{\ddots}}} = a_0 \quad (\text{B.3})$$

On a donc $a_0 = f(i\omega_1)$. De façon similaire, en remarquant que la fraction continue "s'arrête" au coefficient $n - 1$ lorsque l'on prend $z = z_n$, on peut obtenir les coefficients a_i à l'aide de l'algorithme

suivant :

$$a_n = g_{n,n} \quad (\text{B.4})$$

$$g_{1,n} = f(i\omega_n) \quad (\text{B.5})$$

$$g_{i,j} = \frac{g_{i-1,j-1} - g_{i-1,j}}{(i\omega_i - i\omega_{j-1})g_{i-1,j}}. \quad (\text{B.6})$$

De façon pratique, la matrice g est une matrice triangulaire dont un des côtés est rempli par des NaN (en anglais, *Not a Number*) informatiques. Cela ne pose cependant pas de problème puisque l'on ne s'intéresse qu'aux coefficients sur la diagonale de g .

L'algorithme a été programmé par mes soins en un script python nommé PyPade. Ce programme peut être utilisé sous licence MIT et à l'heure où ces lignes sont écrites, le lecteur peut trouver PyPade à l'adresse suivante : https://www.physique.usherbrooke.ca/source_code/. Le fichier archive contenant un README et deux exemples fonctionnels, il n'est guère utile de s'étendre dessus.

Annexe C

Poids de quasi-particules dans un semi-métal de Weyl en DMFT

Dans cette annexe, nous allons démontrer que les propriétés des quasi-particules restent inchangées malgré le comportement en fréquence de la partie imaginaire de la self-énergie d'un semi-métal de Weyl avec interaction d'Hubbard résolu à l'aide de la DMFT. Pour ce faire, nous nous intéressons à la partie réelle de la self-énergie en vérifiant que cette dernière exhibe au moins un comportement linéaire en fréquences réelle.

Partons de la formule 3.19 et utilisons les relations de Kramers-Kronig [48]

$$\Sigma'(\omega) = \mathcal{P} \int \frac{d\tilde{\omega}}{\pi} \frac{\Sigma''(\tilde{\omega})}{\tilde{\omega} - \omega} \quad (\text{C.1})$$

$$\Sigma''(\omega) = -\mathcal{P} \int \frac{d\tilde{\omega}}{\pi} \frac{\Sigma'(\tilde{\omega})}{\tilde{\omega} - \omega} \quad (\text{C.2})$$

où \mathcal{P} désigne la valeur principale de Cauchy. A partir de l'équation C.1, on peut écrire :

$$\Sigma'(\omega) = \mathcal{P} \int \frac{d\tilde{\omega}}{\pi} \frac{\Sigma''(\tilde{\omega}) - \Sigma''(\omega)}{\tilde{\omega} - \omega} + \Sigma''(\omega) \mathcal{P} \int \frac{d\tilde{\omega}}{\pi} \frac{1}{\tilde{\omega} - \omega}. \quad (\text{C.3})$$

Cette astuce mathématique ne repose sur aucune hypothèse sur la self-énergie mais elle nous permet d'aborder la singularité de l'intégrande avec plus de sérénité. En effet, dans le cas d'une partie imaginaire de self-énergie en $\Sigma'' = C\omega^8$ avec C une constante qui dépend du modèle, on peut réécrire la première intégrale du membre de droite dans l'équation C.3 :

$$\mathcal{P} \int \frac{d\tilde{\omega}}{\pi} \frac{\Sigma''(\tilde{\omega}) - \Sigma''(\omega)}{\tilde{\omega} - \omega} = C \int \frac{d\tilde{\omega}}{\pi} (\omega + \tilde{\omega}) (\omega^2 + \tilde{\omega}^2) (\omega^4 + \tilde{\omega}^4). \quad (\text{C.4})$$

Le deuxième membre de l'équation C.3 est une integrale bien connue des mathématiciens et vaut

dans le cas d'une demi-largeur de bande D :

$$\mathcal{P} \int_{-D}^D \frac{d\tilde{\omega}}{\pi} \frac{1}{\tilde{\omega} - \omega} = \frac{1}{\pi} \ln \left(\left| \frac{\omega - D}{\omega + D} \right| \right). \quad (\text{C.5})$$

Ainsi, dans le cas d'un semi-métal dont la demi-largeur de bande vaut D et dont la partie imaginaire de la self-énergie est la même que celle de l'équation 3.19, la partie réelle de la self-énergie devrait s'écrire :

$$\Sigma'(\omega) = -\frac{N^3 U^2}{40320 \pi^6 v_F^9} \left(\frac{2D^7 \omega}{7} + \frac{2D^5 \omega^3}{5} + \frac{2D^3 \omega^5}{3} + 2D\omega^7 - \omega^8 \ln \left(\left| \frac{\omega - D}{\omega + D} \right| \right) \right) \quad (\text{C.6})$$

A cela, il ne faut pas oublier les contributions Hartree-Fock venant du premier ordre du développement en puissance de U de la self-énergie. Ainsi, quoiqu'il arrive, la partie réelle garde au moins une dépendance linéaire dans le cadre d'un semi-métal tridimensionnel, ce qui nous permet d'appliquer une approche de quasi-particules sans nous poser la question de sa validité puisque cela est toujours le cas.

Une petite note par ailleurs : nous avons utilisé un simple modèle effectif de semi-métal de Weyl dont la largeur de bande serait égale à $2D$ pour obtenir ce résultat. Dans le cas d'un modèle sur réseau comme celui de l'équation 3.1, les intégrales des relations de Kramers-Kronig devraient être faites sur l'ensemble de définition du modèle. Cela implique de tenir compte de géométries de bandes électroniques différentes de celle d'une semi-métal de Weyl et d'une partie-imaginaire dont la définition serait différente de celle définie dans l'équation 3.19. La formule C.6 est donc à utiliser avec précaution. Elle nous renseigne néanmoins sur la formidable robustesse des propriétés de quasi-particules dans les semi-métaux de Weyl en DMFT.

Annexe D

Approche perturbative du champ magnétique sur les électrons de Bloch

Cette annexe a pour but de présenter une approche perturbative de l'effet orbital sur les électrons de Bloch dans le régime de Landau. L'approche présentée ici permet d'éviter de déterminer numériquement les niveaux de Landau en utilisant des expressions analytiques à la place. Elle trouve donc toute son utilité lorsque q est grand puisqu'elle évite de diagonaliser numériquement une matrice $q \times q$.

D.1 Matrice de Harper et opérateur d'échelle

Rappelons la matrice de Harper que l'on avait dans le chapitre 5 sur l'effet orbital en DMFT :

$$\Psi_{m+a} + \Psi_{m-a} + 2 \cos(2\pi m \frac{p}{q} - \nu a) \Psi_m = \frac{\epsilon}{t} \Psi_m. \quad (\text{D.1})$$

On prendra à partir de maintenant $a = t = 1$. En faisant une approche continue du réseau, c'est-à-dire en considérant $\Psi_m \rightarrow \Psi(x)$ et en introduisant l'opérateur de translation continu e^{∂_x} , l'équation D.1 s'écrit alors [125] :

$$\left[e^{\partial_x} + e^{-\partial_x} + 2 \cos(2\pi x \frac{p}{q} - \nu) \right] \Psi(x) = \epsilon \Psi(x). \quad (\text{D.2})$$

Un développement limité de l'opérateur de translation et du cosinus à l'ordre deux nous donne l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[-\frac{\partial_x^2}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{q} \right)^2 x^2 \right] \Psi(x) = -\frac{\epsilon + 4}{2} \Psi(x). \quad (\text{D.3})$$

On reconnaît sans mal l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique. De plus, nous n'avons pas tenu compte du moment ν car nous savons que dans le régime de Landau, les énergies propres du système ne dépendent pas de ce dernier.

L'équation D.3 se comprend dans le formalisme des électrons de Bloch. En effet, le développement limité s'est fait autour du maximum du cosinus, ce qui revient à considérer des électrons avec une énergie de dispersion quadratique similaire à celle d'un gaz d'électron.

L'équation D.3 est le premier terme d'un développement en série de Taylor dont seuls les termes pairs sont non nuls. À l'ordre n , la contribution vaut :

$$H_n = -\frac{1}{(2n)!} \left[\partial_x^{2n} + (-1)^n \left(\frac{2\pi}{q} \right)^{2n} x^{2n} \right]. \quad (\text{D.4})$$

La définition usuelle des opérateurs d'échelle dans un oscillateur harmonique quantique nous permet de réécrire l'équation précédente en termes d'opérateurs d'échelle :

$$H_n = -\frac{1}{(2n)!} \left(\frac{2\pi}{q} \right)^{2n} [(a - a^\dagger)^{2n} + (-1)^n (a + a^\dagger)^{2n}], \quad (\text{D.5})$$

avec :

$$a = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\omega_c}} \hat{p} \quad (\text{D.6})$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_c}} \hat{p}. \quad (\text{D.7})$$

On a défini la fréquence de cyclotron $\omega_c = \pi/q$ ainsi que les opérateurs $\hat{p} = \partial_x$ et $\hat{x} = x$.

Ainsi si le terme H_2 vu dans l'équation D.3 nous donne la contribution d'une dispersion quadratique, les autres termes prennent en compte les anharmonicités du cosinus, mais aussi de l'opérateur de translation. Il est donc vain d'espérer retrouver les énergies propres d'un électron de Bloch soumis à un champ magnétique constant en se concentrant seulement sur l'équation d'un oscillateur anharmonique quantique.

D.1.1 Théorie des perturbations

Dans cette section, nous n'allons pas utiliser la théorie des perturbations usuelle de la mécanique quantique, mais plutôt l'approche présentée dans les articles de mathématique [126, 127]. Cette approche se base sur les algèbres de Lie pour obtenir approximativement les énergies propres d'un oscillateur anharmonique quantique. L'idée est assez simple à comprendre : soit H_0 , l'Hamiltonien non perturbé dont on connaît les énergies propres et H_1 , l'Hamiltonien total composé de H_0 et du terme perturbatif. Il peut être prouvé qu'il existe une algèbre de Lie $\mathcal{A}_n = \{L_k\}_{k=1}^N$ fermé dont les éléments permettent de construire un opérateur de passage entre H_0 et H_1 . En d'autres termes, on

peut construire un élément de ce groupe défini comme suit :

$$U := \exp \left(\sum_{k=1}^N \alpha_k L_k \right), \quad (\text{D.8})$$

où $\alpha_k \in \mathbb{C}$ sont des scalaires. Un choix approprié de ces coefficients α_k permet d'obtenir la relation suivante :

$$U^\dagger H_0 U = H_1 - \Lambda_n. \quad (\text{D.9})$$

Ce théorème mathématique est un peu lourd dans une thèse de physique pourtant il peut nous être d'une grande utilité. À partir d'un choix judicieux d'éléments L_k et de scalaires α_k , on peut passer de H_0 à H_1 . Ce passage n'est pas exact et le reste Λ_n correspond précisément aux corrections perturbatives. Le lecteur intéressé par une présentation moins abstraite de ce théorème pourra se tourner vers l'article [126] où une application sur l'oscillateur anharmonique quantique est présentée. Puisque le résultat d'une perturbation de type $\lambda \hat{x}^n$ est déjà fait dans l'article de Jafarpour [126], nous allons appliquer le même raisonnement, mais pour une perturbation de type :

$$\lambda \hat{p}^n = \frac{\lambda}{\sqrt[n]{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^n. \quad (\text{D.10})$$

Pour les opérateurs d'échelle \hat{a} et \hat{a}^\dagger , on a :

$$(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^n = \sum_{m=0}^n \sum_{k=0}^{\min(m, n-m)} \left\{ \begin{matrix} n \\ m \end{matrix} \right\}_k (-1)^{n-m-k} \hat{a}^{m-k} \hat{a}^{\dagger n-m-k}, \quad (\text{D.11})$$

où :

$$\left\{ \begin{matrix} n \\ m \end{matrix} \right\}_k = \frac{n!}{2^k k! (m - m - k)!}. \quad (\text{D.12})$$

La formule D.11 présente l'inconvénient de ne pas ordonner les opérateurs dans le sens normal. En effet, en appliquant directement cette formule, on obtient :

$$(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 = \left\{ \begin{matrix} 2 \\ 0 \end{matrix} \right\}_0 \hat{a}^{\dagger 3} - \left\{ \begin{matrix} 2 \\ 1 \end{matrix} \right\}_0 \hat{a} \hat{a}^\dagger + \left\{ \begin{matrix} 2 \\ 1 \end{matrix} \right\}_1 + \left\{ \begin{matrix} 2 \\ 2 \end{matrix} \right\}_2 \hat{a}^2 \quad (\text{D.13})$$

$$= \hat{a}^2 - 2\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^{\dagger 2} + 1 \quad (\text{D.14})$$

au lieu de

$$(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 = \hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1. \quad (\text{D.15})$$

Nous verrons dans la suite que cela ne pose pas vraiment de problème. Pour une perturbation du

premier ordre en λ , on peut construire l'algèbre de Lie avec les éléments :

$$L_1 = H_0 \quad (D.16)$$

$$L_2 = H_1 \quad (D.17)$$

$$[L_1, L_2] = \sum_{k=3}^j c_{12k} L_k. \quad (D.18)$$

Nous cherchons les éléments L_k de la forme suivante : $\lambda(\hat{a}^{\dagger t} \hat{a}^s + \hat{a}^{\dagger s} \hat{a}^t)$. On ne cherche pas d'éléments proportionnels à une puissance de la perturbation λ supérieure à un car nous ne voulons pas à déterminer les corrections perturbatives d'ordre supérieur à λ .

Cette étape diffère quelque peu de ce qui a été fait pour des perturbations qui sont une fonction de \hat{x} . En effet, la formule D.11 n'ordonne pas les opérateurs d'échelle dans le même sens que les éléments de l'algèbre. On peut néanmoins réordonner les opérateurs en utilisant la formule :

$$[\hat{a}^m, \hat{a}^{\dagger n}] = \sum_{k=1}^{\min(n,m)} k! \binom{m}{k} \binom{n}{k} \hat{a}^{\dagger} \hat{a}. \quad (D.19)$$

Ainsi, essayons d'obtenir les éléments L_k :

$$[H_0, H_1] = \left[\hat{a}^{\dagger} \hat{a}, \frac{\lambda}{2^n} (\hat{a} - \hat{a}^{\dagger})^{2n} \right] \quad (D.20)$$

$$= \frac{\lambda}{2^n} \sum_{k,m} \left\{ \begin{matrix} 2n \\ m \end{matrix} \right\}_k (-1)^{2n-m-k} [\hat{a}^{\dagger} \hat{a}, \hat{a}^{2n-m-k} \hat{a}^{\dagger m-k} + \hat{a}^{m-k} \hat{a}^{\dagger 2n-m-k}] \quad (D.21)$$

$$= \frac{\lambda}{2^n} \sum_{k,m} \left\{ \begin{matrix} 2n \\ m \end{matrix} \right\}_k (-1)^{m+k} ([\hat{a}^{\dagger} \hat{a}, \hat{a}^{\dagger m-k} \hat{a}^{2n-m-k} + (-1)^{2n} \hat{a}^{\dagger 2n-m-k} \hat{a}^{m-k}] + \sum_j j! \binom{m-k}{j} \binom{2n-m-k}{j} [\hat{a}^{\dagger} \hat{a}, \hat{a}^{\dagger m-k-j} \hat{a}^{2n-m-k-j} + \hat{a}^{\dagger 2n-m-k-j} \hat{a}^{m-k-j}]) \right). \quad (D.22)$$

En utilisant la relation de commutation suivante :

$$[\hat{a}^{\dagger} \hat{a}, \hat{a}^{\dagger k} \hat{a} \pm \hat{a}^{\dagger l} \hat{a}^k] = (k-l) \hat{a}^{\dagger k} \hat{a} \mp \hat{a}^{\dagger l} \hat{a}^k, \quad (D.23)$$

on peut donc écrire l'ensemble des éléments du groupe d'algèbre de Lie que nous cherchons sous la forme : $\lambda(\hat{a}^{\dagger k} \hat{a} - \hat{a}^{\dagger l} \hat{a}^k)$. De plus, nous n'avons pas à calculer les coefficients des équations précédentes puisque nous les absorberons dans les définitions de α_k .

Aucun des éléments L_k n'est une fonction de $\hat{a}^{\dagger j} \hat{a}^j$ puisqu'on peut réécrire ces derniers comme

une fonction de $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ qui commute avec H_0 . Cela se prouve en utilisant l'équation D.19 plusieurs fois :

$$\hat{a}^{\dagger j} \hat{a}^j = \hat{a}(\hat{a}^{\dagger k-1} \hat{a}) \hat{a}^{\dagger k-1} = \hat{a}^\dagger (\hat{a} \hat{a}^{\dagger k-1} - (k-1) \hat{a}^{\dagger k-2}) \hat{a}^{k-1} \quad (\text{D.24})$$

$$= (\hat{a}^\dagger \hat{a} - (k-1)) \hat{a}^{\dagger k-1} \hat{a}^{j-1} \quad (\text{D.25})$$

$$= (\hat{a}^\dagger \hat{a} - (k-1)) (\hat{a}^\dagger \hat{a} - (k-2)) \dots (\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1) \hat{a}^\dagger \hat{a}. \quad (\text{D.26})$$

Ainsi, pour le ket associé à l'index n , on a facilement :

$$\hat{a}^{\dagger k} \hat{a}^k |n\rangle = k! \binom{n}{k} |n\rangle. \quad (\text{D.27})$$

Digression faite, grâce aux éléments L_k , l'opérateur U prend la forme suivante :

$$\hat{U} := \exp(\hat{X}), \quad (\text{D.28})$$

avec :

$$\hat{X} := \lambda \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{m=1}^{2n-1} \alpha_{m,l} (\hat{a}^{\dagger 2m-1-l} \hat{a}^l - \hat{a}^{\dagger l} \hat{a}^{2m-1-l}). \quad (\text{D.29})$$

De plus, l'opérateur \hat{U} est unitaire ($U^\dagger = U^{-1}$) en imposant les coefficients $\alpha_{m,l}$ réels. On peut donc utiliser le lemme d'*Hadamard* [126] pour la dernière étape de dérivation :

$$U^\dagger H_0 U = H_0 + [\hat{X}, \hat{H}_0] + \frac{1}{2!} [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{H}_0]] + \dots \quad (\text{D.30})$$

On s'arrête à la première commutation puisque l'on se concentre sur les corrections proportionnelles à λ . Finalement, on peut remarquer que :

$$[\hat{X}, \hat{H}_0] = \lambda \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{m=1}^{2n-1} \alpha_{m,l} [\hat{a}^{\dagger 2m-1-l} \hat{a}^l - \hat{a}^{\dagger l} \hat{a}^{2m-1-l}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] \quad (\text{D.31})$$

$$\propto \hat{a}^{\dagger r} \hat{a}^s + \hat{a}^{\dagger s} \hat{a}^r. \quad (\text{D.32})$$

La dérivation de ces commutateurs étant longue et fastidieuse, allons directement à la conclusion : comme le commutateur $[X, H_0]$ est proportionnel à $\hat{a}^{\dagger r} \hat{a}^s + \hat{a}^{\dagger s} \hat{a}^r$ et en se basant sur notre précédente dérivation du commutateur $[H_0, H_1]$, il apparaît que l'on peut ajuster l'ensemble des coefficients $\alpha_{m,l}$ pour écrire :

$$[X, H_0] = \lambda \hat{p}^{2n} - \mathcal{O}(\hat{a}^{\dagger k} \hat{a}^k). \quad (\text{D.33})$$

En effet, la digression précédente avait pour but de mettre en évidence l'absence de terme $\hat{a}^{\dagger k} \hat{a}^k$ dans les éléments de l'algèbre de Lie. Il apparaît que l'on ne peut pas avoir d'égalité stricte entre le commutateur et la perturbation lorsque cette dernière est une puissance paire de \hat{p} à la différence des puissances impaires. Avant de donner une expression mathématique de $\mathcal{O}(\hat{a}^{\dagger k} \hat{a}^k)$, on peut vérifier l'affirmation précédente à l'aide d'un exemple simple $\hat{H}_1 = \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2 + \lambda \hat{p}$. Les éléments de l'algèbre de Lie sont donc $\hat{L}_1 = \hat{H}_0$, $\hat{L}_2 = \hat{H}_1$, $\hat{L}_3 = \lambda(\hat{a}^\dagger + \hat{a})$ et I , l'identité¹.

1. Nous n'avons pas parlé de cet élément avant, mais il faut se souvenir qu'il existe toujours un élément

Notre opérateur U prend donc la forme :

$$U = \exp [\alpha \lambda (\hat{a}^\dagger + \hat{a})] \quad (\text{D.34})$$

En utilisant la formule $[A, e^B] = \beta e^B$ pour $[A, B] = \beta$ avec β un scalaire, on obtient :

$$\hat{U}^\dagger \hat{H}_0 \hat{U} = \hat{U}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{U} + \frac{1}{2} \quad (\text{D.35})$$

$$= \hat{U}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{U} (\alpha \lambda + \hat{a}) + \frac{1}{2} \quad (\text{D.36})$$

$$= (-\alpha \lambda + \hat{a}^\dagger)(\alpha \lambda + \hat{a}) + \frac{1}{2} \quad (\text{D.37})$$

$$= \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} - \alpha \lambda (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) - (\alpha \lambda)^2. \quad (\text{D.38})$$

Ainsi, il suffit de prendre $\alpha = 1/\sqrt{2}$ pour avoir :

$$\hat{U}^\dagger \hat{H}_0 \hat{U} = \hat{H}_1 + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (\text{D.39})$$

On retrouve bien le fait qu'il n'existe pas de correction en λ lorsque la puissance de la perturbation est impaire.

Revenons maintenant à la dérivation des corrections d'une perturbation de la forme : $\lambda \hat{p}^{2n}$. Pour ce faire, remarquons que les seuls termes restants lorsque l'on essaye de «reconstruire» \hat{H}_1 sont du type :

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{2^n} \sum_{j=0}^n (-1)^j \left\{ \begin{matrix} 2n \\ n \end{matrix} \right\}_{n-j} \hat{a}^j \hat{a}^{\dagger j} &= \frac{\lambda}{2^n} \sum_{j=0}^n (-1)^j \left\{ \begin{matrix} 2n \\ n \end{matrix} \right\}_{n-j} \left(\hat{a}^{\dagger j} \hat{a}^j \right. \\ &\quad \left. + \sum_k^j k! \binom{j}{k} \binom{j}{k} \hat{a}^{\dagger j-k} \hat{a}^{j-k} \right). \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

Grâce à l'équation D.27, la correction d'un terme perturbatif proportionnel à $\lambda \hat{p}^{2n}$ à l'énergie propre du ket $|N\rangle$ d'un oscillateur harmonique est :

$$\frac{\lambda}{2^n} \sum_{j=0}^n (-1)^j \left\{ \begin{matrix} 2n \\ n \end{matrix} \right\}_{n-j} \left[j! \binom{N}{j} + \sum_{k=1}^j k! \binom{j}{k} \binom{j}{k} (j-k)! \binom{N}{j-k} \right]. \quad (\text{D.41})$$

Cette dérivation s'est appuyée intensivement sur l'article de Jafarpour et le formalisme qu'il introduit pour dériver les perturbations dues aux opérateurs de translation dans le développement de la matrice de Harper. Le cas d'une perturbation proportionnelle à $\lambda \hat{x}^n$ ayant déjà été faite [126], nous ne le referons pas dans cette annexe, mais nous utiliserons ses résultats : pour une perturbation

identité dans un algèbre de Lie.

du type $\lambda \hat{x}^{2n}$, la correction aux énergies du ket $|N\rangle$ est :

$$\frac{\lambda}{2^n} \sum_{j=0}^n \left\{ \begin{matrix} 2n \\ n \end{matrix} \right\}_{n-j} j! \binom{N}{j}. \quad (\text{D.42})$$

On a donc tout ce qu'il nous faut pour obtenir les corrections du premier ordre introduites par les Hamiltoniens \hat{H}_n (cf. équation D.5)

D.1.2 Comparaison de notre développement perturbatif :

Pour illustrer la justesse de nos calculs, on peut comparer notre calcul perturbatif avec les énergies propres de l'Hamiltonien de Harper obtenues par diagonalisation numérique. Les corrections aux énergies sont compilées sur le tableau D.1. Lorsque l'on prend les trois premiers Hamiltoniens D.5 pour obtenir des valeurs approchées des énergies propres de l'Hamiltonien de Harper D.1, on obtient une erreur inférieure à 5% sur les 65% premiers «niveaux de Landau». On peut encore augmenter ce score pour coller au plus près des énergies propres en prenant les corrections au premier ordre d'Hamiltoniens H_n d'indice supérieur à 3.

Il y a cependant un bémol dans cette approche. En effet, l'espacement entre deux niveaux de Landau consécutifs est au mieux de $\omega_c = 4\pi/q$. Pour des q phénoménalement grands, c'est-à-dire pour des valeurs de champs magnétiques réalistes, cette différence d'énergie est trop petite comparée aux autres échelles d'énergie comme le terme d'Hubbard, la température ou bien même l'élargissement numérique des Lorentzienne². De plus, il paraît improbable que ce développement soit valable jusqu'au demi-remplissage. En effet, le paradigme de cette approche perturbative repose essentiellement sur le fait de pouvoir écrire les énergies propres du système comme des niveaux de Landau, or, cela ne semble pas applicable au niveau d'une singularité de van Hove. On peut aussi étayer ce dernier argument avec le comportement du temps de demi-vie des quasi-particules (cf. Figure 5.5(b)).

Enfin, il semble que cette méthode soit déjà connue des physiciens puisqu'il y est fait mention dans l'article [125]. Cependant, comme nous n'avons pas trouvé de dérivation rigoureuse à notre connaissance, il nous semble utile de le faire en annexe.

2. On prend généralement $\eta = 0.02$.

ordre de correction	énergie
ordre 0	-4
premier ordre	$\frac{4\pi}{q} \left(n + \frac{1}{2}\right)$
second ordre	$-\frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{q}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1)$
troisième ordre	$\frac{1}{360} \left(\frac{\pi}{q}\right)^3 (40n^3 + 60n^2 + 80n + 30)$

TABLE D.1 Corrections aux énergies propres de l'Hamiltonien de Harper en fonction de l'index n .

Annexe E

Phases magnétiques et transition de Mott dans les conducteurs organiques

Les travaux présentés dans cet annexe ont fait l'objet d'une article [128].

Introduction

Bien que déconnecté des travaux sur les semi-métaux de Weyl, cet article sur les conducteurs organique est le premier sujet de recherche de cette thèse. C'est pour cela que, bien que présent dans ce manuscrit, il se retrouve en annexe.

La synthèse et à l'étude expérimentale du conducteur organique $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ [129] a ouvert une nouvelle voie de recherche sur les conducteurs organique. En effet, $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ est un matériau organique qui peut être modélisé comme un réseau triangulaire anisotrope. Cette anisotropie vient de la présence de deux termes de saut différents entre les site du réseau, t et t' . Avant la synthèse de ce dernier, les conducteurs organiques connus avaient systématiquement $t > t'$, or, $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ est caractérisé par le fait que $t' \approx 1.5t$. Ce caractère quasi unidimensionnel assez particulier ainsi que la frustration géométrique du réseau triangulaire pourraient être à l'origine d'une physique exotique puisqu'il semble que $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ exhibe une phase de liquide de spin à très faible température [129].

Pour étudier ce composant, nous nous proposons de vérifier ces résultats expérimentaux à la lumière de la théorie du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT pour *cluster dynamical mean-field theory*) [108, 109]. Cette méthode avait déjà été utilisée avec succès pour modéliser les conducteurs organiques lorsque $t > t'$ [130, 131, 132]. Le fait d'utiliser un amas plutôt qu'un seul site d'impureté est particulièrement approprié pour cette études. En effet, outre le fait que les méthodes sur amas

permettent de mieux modéliser les fluctuations anti-ferromagnétiques dues à l'interaction d'Hubbard, la CDMFT permet de vérifier un certain nombre de phases avec brisure de symétrie (phases magnétiques, supraconductivité, etc.).

Une meilleure introduction du sujet ainsi qu'une compilation des résultats sont présentés dans l'article [E.1](#). Cette étude nous a permis de mettre en évidence le lien subtil entre les résultats de la CDMFT avec la géométrie de l'amas utilisé. De plus, il semble que sous cette théorie, le composant exhibe une phase magnétique particulière où les spins s'enchaînent de façon anti-ferromagnétique le long de l'axe y mais de façon ferromagnétique le long de l'axe x . La présence de cette phase magnétique invalide donc l'hypothèse d'un liquide de spin pour la valeur de t'/t de $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ dans le paradigme de la CDMFT.

E.1 Article

Mott transition and magnetism on the anisotropic triangular lattice

S. Acheche,¹ A. Reymbaut,¹ M. Charlebois,¹ D. Sénéchal,¹ and A.-M. S. Tremblay^{1,2}

¹*Département de physique, Institut Quantique and Regroupement québécois sur les matériaux de pointe, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1*

²*Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario, Canada, M5G 1Z8*

(Received 23 August 2016; revised manuscript received 25 November 2016; published 23 December 2016)

Spin-liquid behavior was recently suggested experimentally in the moderately one-dimensional organic compound κ -H₃(Cat-EDT-TTF)₂. This compound can be modeled by the one-band Hubbard model on the anisotropic triangular lattice with $t'/t \simeq 1.5$, where t' is the minority hopping. It thus becomes important to extend previous studies, that were performed in the range $0 \leq t'/t \leq 1.2$, to find out whether there is a regime where Mott insulating behavior can be found without long-range magnetic order. To this end, we study the above model in the range $1.2 \leq t'/t \leq 2$ using cluster dynamical mean-field theory (CDMFT). We argue that it is important to choose a symmetry-preserving cluster rather than a quasi-one-dimensional cluster. We find that, upon increasing t'/t beyond $t'/t \approx 1.3$, the Mott transition at zero temperature is replaced by a first-order transition separating a metallic state from a collinear magnetic insulating state excluding the possibility to find a quantum spin liquid for the physically relevant value $t'/t \simeq 1.5$. The phase diagram obtained in this study can provide a working basis for moderately one-dimensional compounds on the anisotropic triangular lattice.

DOI: [10.1103/PhysRevB.94.245133](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.245133)

I. INTRODUCTION

Organic superconductors of the BEDT family exhibit fascinating phenomena due to the interplay between strong electronic correlations and large magnetic frustration [1,2]. For instance, their rich phase diagram contains d -wave superconducting, antiferromagnetic [3], and possibly quantum spin liquid states at absolute zero [4,5]. At finite temperature, a Mott metal-insulator transition has clearly been identified [3]. Recently, a moderately one-dimensional organic compound has been synthesized [6]. This 2D organic Mott insulator, κ -H₃(Cat-EDT-TTF)₂, does not exhibit magnetic order at very low temperature ($T = 50$ mK), which makes it a serious candidate for a quantum spin liquid. Microscopically, the simplest model describing this organic compound is the two-dimensional single-band Hubbard model on an anisotropic triangular lattice [6]. This model is the same as that often used for BEDT organic compounds [7–10].

Quantum spin liquids are unusual phases of matter characterized by a nonmagnetic insulating ground state in which spins continue to fluctuate even at zero temperature due to quantum fluctuations. In crystals, these peculiar phases are expected to appear for various reasons, the most prominent one being lattice geometries, such as kagome or triangular lattices [11], where near-neighbor magnetic interactions are intrinsically frustrated. Spin liquids became an intense research topic of research when P.W. Anderson proposed them to be a building block for the physics of high-temperature superconductors [12].

In order to focus our attention on κ -H₃(Cat-EDT-TTF)₂, we study the phase diagram of this model in the moderately one-dimensional (M1d) regime characterized by a ratio between the hopping terms t' and t , defined in Fig. 1(a), larger than unity. Since we are interested in the Mott transition and the possibility of a spin liquid, we use cellular dynamical mean-field theory (CDMFT) [13,14], a cluster extension of dynamical mean-field theory (DMFT) that can treat both the metallic and the insulating phases, the Mott transition between them as well as magnetic phases [15].

Before we proceed, we briefly recall related studies, setting aside superconductivity that we do not consider here [16]. Previous work focused mostly on the frustrated regime $0 \leq t'/t \leq 1$ (square lattice to triangular lattice) since these anisotropy values, usually obtained from *ab initio* calculations [17–21], corresponded to all known BEDT organic compounds. Theoretical investigations that were concerned with the Mott transition in the interaction-frustration ($U/t - t'/t$) phase diagram used methods that included path-integral renormalization group [22], variational methods [23,24], exact diagonalization [25], variational cluster approximation [26], CDMFT [27–30], and dual-fermion approaches [31]. Although there are quantitative discrepancies between the different methods, metallic, insulating, nonmagnetic, and antiferromagnetic phases were found, generally in good agreement with experiments [3–5]. A more detailed comparison between experiment and some of the above theoretical calculations appears in Ref. [17]. CDMFT was one of the most successful approaches [28].

More recently, the M1d regime ($1 \leq t'/t \leq 2$) has been investigated [32,33]: For $t'/t \approx 1$, the Hubbard model exhibits a spiral order and possibly a spin liquid phase. Different theoretical lattice approaches seem to agree with the presence of a spin liquid and a collinear magnetic state with an associated ordering vector $\mathbf{Q} = (0, \pi)$ for $t'/t \geq 1.2$ [34,35], even though they do not completely agree on the precise form of the phase diagram, unlike for the case $t'/t < 1$. In the strong-interaction limit, i.e., for $U \gg t, t'$, where the Hubbard model in the insulating phase reduces to the Heisenberg model with exchange interactions $J = 4t^2/U$ and $J' = 4t'^2/U$ to second order in perturbation theory [36] and, at higher order, to models with more complicated spin interactions, such as the two distinct ring exchange couplings $K = 80t^4/U^3$ and $K' = 80t'^2t^2/U^3$ [37]. The Heisenberg model corresponding to the M1d regime, i.e., $1 \leq J'/J \leq 2$ has been extensively studied using different methods such as linear spin-wave [38,39], coupled cluster method [40], variational Monte-Carlo [41,42], or density matrix renormalization group [43]. These methods

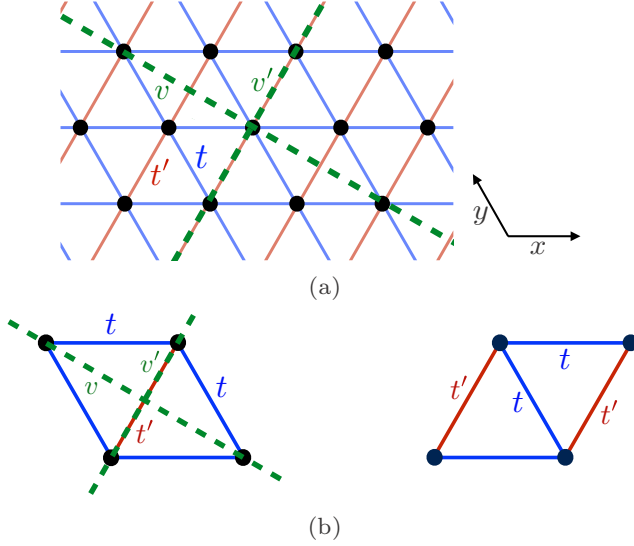


FIG. 1. (a) Illustration of the anisotropic triangular lattice with dashed green lines emphasizing the two mirror planes v and v' . (b) While the first cluster geometry, called the symmetry-preserving (SP) cluster, displays the same symmetries v and v' as the infinite lattice, the second cluster geometry, called the quasi-one-dimensional (Q1d) cluster, does not.

show that a spiral state is present for $J'/J \approx 1$, but they give different magnetic phases in the M1d regime, e.g., a spiral phase, a collinear magnetic phase, or a spin liquid state. More sophisticated Hamiltonians including the ring exchange coupling K in the anisotropic triangular lattice give a rich phase diagram where the presence of a Néel state, a spin liquid state, or a spiral phase depends on the relative strength between K/J and J'/J [44].

This paper is organized as follows: The Hubbard model and the cellular dynamical mean-field theory (CDMFT) on a plaquette with an exact diagonalization (ED) impurity solver are detailed in Sec. II. In Sec. III A, results for the normal state, showing a first order Mott metal-insulator transition are presented. Magnetic states are explored in Sec. III B. Our results are summarized in the phase diagram of Fig. 5. Finally, the choice of cluster is motivated in Sec. IV, where we show, by comparing results for the magnetic phases with other methods, that a cluster sharing symmetries with the lattice is essential for a reliable CDMFT calculation in this regime. We conclude in Sec. V.

II. MODEL AND METHOD

We focus on the physics embodied in the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice

$$\hat{H} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma}. \quad (1)$$

All quantities are expressed in natural units ($\hbar \equiv 1$ and $k_B \equiv 1$). Here, t_{ij} are the hopping amplitudes between sites i and j and can take two different values, t and t' , illustrated in Fig. 1. The Fourier transform of the hopping amplitudes t_{ij} determines the anisotropic bare dispersion

$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t[\cos(k_x) + \cos(k_y)] - 2t'\cos(k_x + k_y)$. The on-site Coulomb repulsion is U and μ is the chemical potential set so that the system is half filled. For that filling, the signs of t and t' do not modify the phase diagram. Layered organic compounds are usually half filled, but doped compounds [45,46] have been investigated experimentally [47,48] and theoretically [49,50].

We focus on the M1d regime $1.2 \leq t'/t \leq 2$ using CDMFT [13,14], a cluster extension of dynamical mean-field theory (DMFT) [15]. CDMFT approximates the infinite lattice as a finite size cluster self-consistently coupled to a bath of noninteracting electrons, thus taking into account dynamical correlations as well as spatial correlations up to the size of the cluster [51,52]. CDMFT, like DMFT, maps the system into an Anderson impurity problem, which is then solved self-consistently. In this paper, the quantum impurity problem is solved using the exact diagonalization (ED) method [53] at zero temperature. This method is restricted to a small number N_b of bath sites. While the Hamiltonian of the quantum impurity problem is coded exactly, the ground state and the Green functions of interest are found in a quasisexact way with the Lanczos algorithm [52]. Exact diagonalization is robust in the presence of frustration, unlike quantum Monte-Carlo methods which suffer from the infamous sign problem [54]. Moreover, it directly computes dynamical quantities as a function of real frequencies. To summarize, the assumption inherent to cluster approaches is that the essential physics of the system originates from short-ranged correlations, which should be the case in strongly-correlated magnetically-frustrated organic compounds.

We solve the following cluster-bath Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \\ & + \sum_{m,\sigma} \epsilon_{m\sigma} \hat{b}_{m\sigma}^\dagger \hat{b}_{m\sigma} \\ & + \sum_{m,i,\sigma} \theta_{mi\sigma} (\hat{b}_{m\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} + \text{H.c.}), \end{aligned} \quad (2)$$

where the indices $i, j = 1, \dots, N_c$ label the sites within the cluster whereas $m = 1, \dots, N_b$ label the bath sites. The second quantized operators $\hat{c}_{i\sigma}$ and $\hat{b}_{m\sigma}$ annihilate electrons on the cluster and in the bath, respectively. t_{ij} are the hopping matrix elements within the cluster, $\epsilon_{m\sigma}$ are the bath energies, and $\theta_{mi\sigma}$ are the bath-cluster hybridization matrix elements. Besides, in order to allow antiferromagnetism to appear, $\epsilon_{m\sigma}$ and $\theta_{mi\sigma}$ explicitly carry a spin variable σ . A complication of the ED method is that the CDMFT self-consistency condition cannot be satisfied exactly because of the finite number of bath sites. This condition is rather satisfied approximately by minimizing a distance function. For further information on the matter, see Refs. [53,55], and [56]. We use the same distance function parameters as in the last two references, namely a frequency cutoff at $\omega_n/t = 2$ and a “fictitious” inverse temperature $\beta/t = 50$. To check that there are no artifacts associated with the finite bath, we checked our results for the Mott transition using CDMFT with a continuous-time quantum Monte-Carlo (CTQMC) impurity solver [57,58] at finite but low temperature ($\beta/t = 20$). For both clusters that we describe below, we found

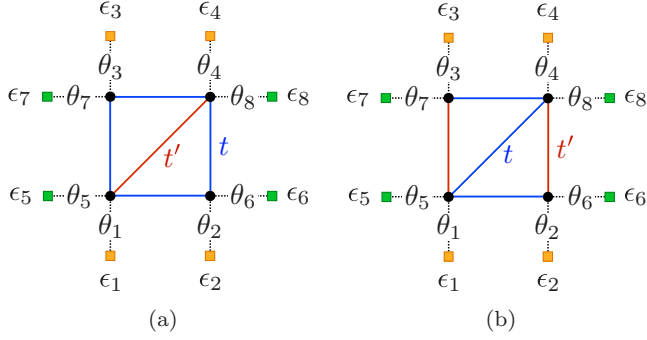


FIG. 2. (a) Symmetry preserving (SP) cluster. (b) Quasi-one-dimensional (Q1d) cluster. The four cluster sites are black circles, and the bath sites are green and orange squares. For simplicity, spin indices σ for the bath energies $\epsilon_{m,\sigma}$ and cluster and spin indices i,σ for the bath-cluster hybridization matrix elements $\theta_{m,i,\sigma}$ are not explicitly shown. Depending on the symmetry of the phase being explored, some of the variational parameters are taken equal. Note that the bath sites do not have a position in real space and that the Q1d cluster does not share the symmetries of the lattice, contrary to the SP cluster.

agreement with our CDMFT plus ED solver for the values of t'/t that we tested (0.4 and 1.5) [59].

As illustrated in Fig. 2, we use clusters of $N_c = 4$ sites coupled to $N_b = 8$ bath sites. Although the calculation is for 2×2 clusters, we expect to capture the main physics of the lattice since studies using CDMFT have confirmed that results on a 2×2 cluster are quantitatively similar to those on larger clusters, at least at high temperature [60]. All physical results presented in the next sections are extracted from the symmetry-preserving (SP) cluster of Fig. 1(b), whose parametrization within the model Eq. (2) is detailed in Fig. 2(a). For large values of t'/t , one might argue that the quasi-one-dimensional character of the lattice must be present in the cluster. In order to shed light on this question, the quasi-one-dimensional (Q1d) cluster of Fig. 1(b), whose parametrization within the model Eq. (2) is detailed in Fig. 2(b), has also been investigated. Our results, presented in the following sections, will show that the physics extracted from this second cluster geometry does not compare well with other methods, leading us to conclude that the SP cluster is a better representation of the infinite lattice in the M1d regime.

III. RESULTS

A. Mott transition

First, let us focus on the Mott transition in the normal state. Magnetic states are forbidden if one suppresses the spin dependence of the bath parameters. The phase diagram was obtained by changing t'/t in steps of 0.1 and varying U/t in much smaller steps. Therefore, the values of t'/t quoted for phase boundaries in the following have an uncertainty of order ± 0.05 . We find that as long as $t'/t \leq 1.2$, the double occupancy displays hysteresis bounded by jumps at U_{c1} and U_{c2} as U decreases or increases, respectively ($U_{c1} \leq U_{c2}$). These jumps are the signature of the usual Mott transition. For the SP cluster at $t'/t \geq 1.3$, the hysteresis region is still

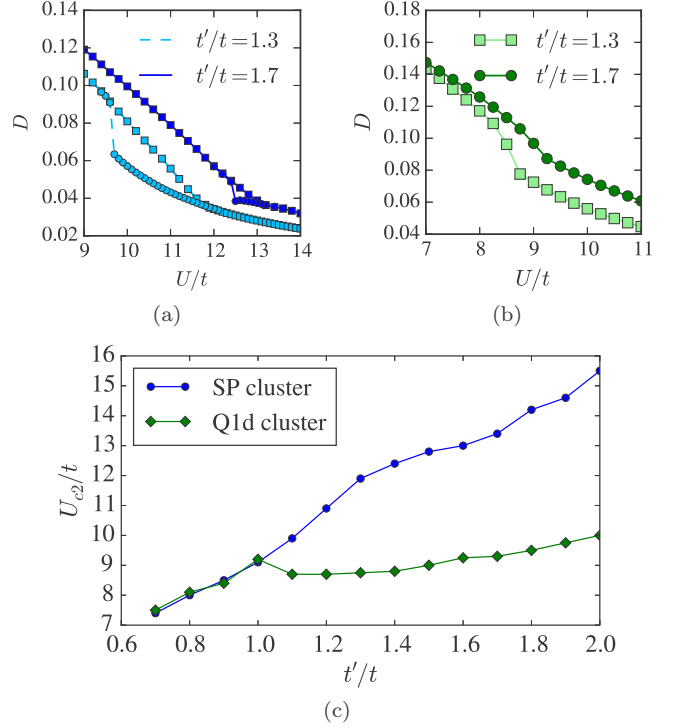


FIG. 3. (a) Double occupancy $D = \langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle$ for the SP cluster as a function of U/t for $t'/t = 1.3$ (sky blue dashed line) and $t'/t = 1.7$ (dark blue solid line). While the jump at low interaction defines the lower critical ratio U_{c1}/t , the change of slope at higher interaction defines the upper critical ratio U_{c2}/t . (b) Double occupancy for the Q1d cluster as a function of U/t for $t'/t = 1.3$ (light green solid line) and $t'/t = 1.7$ (dark green solid line). Here, the change of slope defines a critical ratio U_{c2}/t analog to the upper critical ratio of the SP cluster. It is investigated further through the low-frequency behavior of the local density of states, Fig. 4. (c) Mott critical ratio U_{c2}/t as a function of t'/t for the SP and Q1d clusters, in dark blue and dark green, respectively. For $t'/t \leq 1$, the results are quantitatively equivalent but differences clearly appear just above $t'/t = 1$.

present but is bounded by a jump only when U decreases. As U increases, a mere change of slope occurs, as shown in Fig. 3(a). Even without a jump in the double occupancy, the Mott transition can be observed by studying the low-frequency behavior of the local density of states $A(\omega)$, as presented in Fig. 4 for $t'/t = 1.3$. For $U/t = 11.84$, slightly smaller than the upper critical ratio U_{c2}/t at $t'/t = 1.3$, the local density of states exhibits a low-frequency metallic behavior. When U/t is increased only by a tiny fraction to $U/t = 11.9$, the opening of an insulating gap in the local density of states signals the Mott transition. The Mott transition of the Q1d cluster, presented in Fig. 3(b), does not even feature a jump or some hysteresis in the double occupancy. The local density of states, however, indicates a Mott transition (not shown).

The critical ratios U_{c2}/t presented in Fig. 3(c) as a function of t'/t illustrate one of the main differences between the two cluster geometries considered in this paper. Indeed, for $t'/t > 1$, U_{c2}/t first decreases before increasing for the Q1d cluster whereas it only increases monotonically for the SP cluster. The later trend as a function of t'/t is expected if we accept the

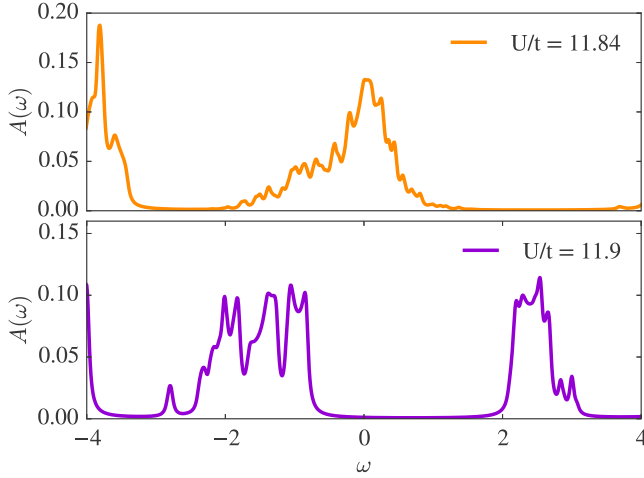


FIG. 4. Local density of states $A(\omega)$ for $t'/t = 1.3$ in the normal state at $U/t = 11.84$ and $U/t = 11.9$ on the SP cluster. A Lorentzian broadening $\eta = 0.035$ was used. A metal-insulator transition occurs between these two values of U/t .

simple picture that the critical value U_c for the Mott transition should increase with bandwidth. Surprisingly, this discrepancy between the two cluster geometries does not hold for $t'/t \leq 1$ since both geometries yield the same value of U_{c2}/t even if one could assume that the Q1d cluster should be more appropriate only in the M1d regime. An acceptable explanation for this phenomenon has not been found yet, but the following section will give arguments that lead us to believe that the results for the SP cluster capture the correct physics.

B. Magnetic states

Within CDMFT, one can only look for commensurate magnetic orders on the cluster. Therefore, this restriction does not allow us to explore all possible magnetic phases nor to distinguish between a spin liquid and an incommensurate magnetic order (in the sense of a magnetic order whose unit cell does not perfectly fit or repeat within the cluster). Hence, we can only rule out a spin liquid by demonstrating that a magnetic phase exists, but we cannot prove that a spin liquid state will occur since we cannot explore all possible magnetic states. In other words, not finding one of the allowed magnetic states of our cluster in a Mott insulating phase is a necessary, but not sufficient, condition for a spin liquid. A spin-liquid state could occur only in a nonmagnetic insulating state (NMI state).

For reasons that will become clear below, we present our final phase diagram, including magnetic order, only for the SP cluster. One can check from Fig. 5(a) that for $t'/t \leq 1.2$, we find the same results as in Ref. [28], namely a transition from a metal to a Néel state for $t'/t \leq 0.7$, followed by a NMI state that starts right above the Mott transition for $t'/t \approx 0.7$ and then undergoes a Néel transition at larger U/t if $0.7 \lesssim t'/t \lesssim 0.9$. We did not investigate $U/t > 12$. Previous studies indicate that a spiral order or a spin liquid could be present in this area of the phase diagram [24,32,61], corresponding to the NMI state of Fig. 5(a).

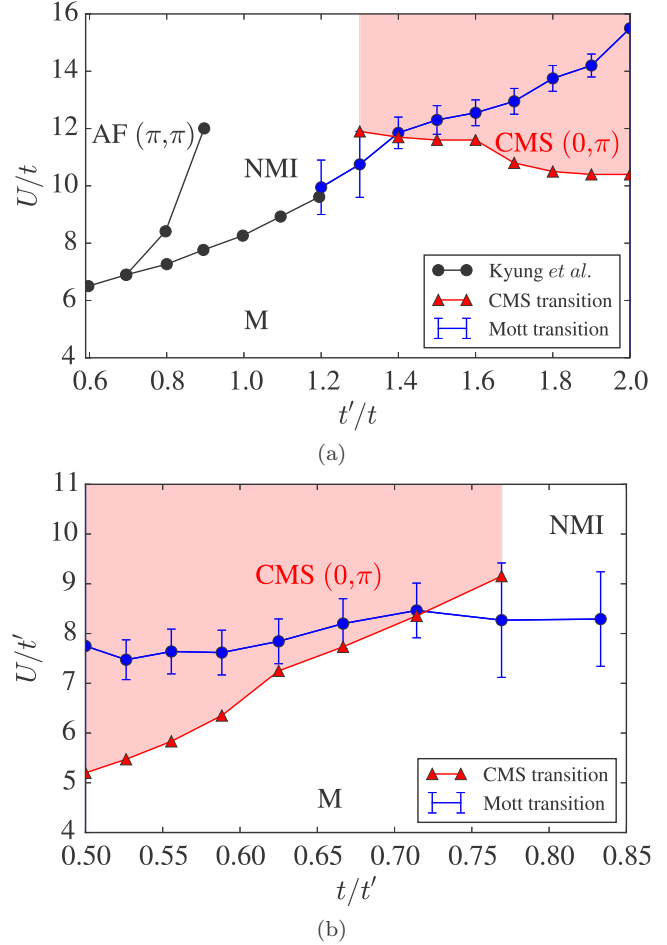


FIG. 5. (a) Phase diagram for the Hubbard model obtained with CDMFT on the SP cluster. Black curve: Data from a previous study of the low-frustration phase diagram carried out by Kyung *et al.* (Ref. [28]). Blue curve: Mott transition in the nonmagnetic normal state. The bars indicate the boundaries of the coexistence region. Red triangles: Metal to collinear magnetic state transition. Here, only U_{c2}^{CMS}/t is displayed. The lower critical interaction U_{c1}^{CMS}/t cannot always be found due to some numerical instabilities. Red area: The collinear magnetic phase with wave vector $\mathbf{Q} = (0, \pi)$. AF, NMI, CMS, and M denote the Néel state, the nonmagnetic insulator, the collinear magnetic state, and the metallic state, respectively. (b) Same phase diagram with t' as energy unit, namely U/t' vs t/t' for $1.2 \leq t'/t \leq 2$. This phase diagram can be more easily compared with the results of Ref. [34].

For $t'/t \geq 1.3$, a first-order transition between a metal and a collinear magnetic insulating state takes place for $(0, \pi)$ or $(\pi, 0)$ upon increasing U/t , as shown in Fig. 5(a), and survives at larger values of U/t . This transition occurs systematically before the Mott transition in the sense that U_{c2}^{CMS}/t is smaller than U_{c2}/t . The presence of this phase is not surprising since different studies predict the appearance of this magnetic phase in the M1d regime using lattice models [34,35] or spin models [40,43,44,62]. At this magnetic transition, we observe a jump in the double occupancy and a gap opening in the spectral function. Some hysteresis can be seen in the double occupancy, but while the upper critical interaction

U_{c2}^{CMS} can always be detected for any value of t'/t , the lower critical interaction U_{c1}^{CMS} cannot always be found due to some numerical instability [hence the absence of bars for the red triangles of Fig. 5(a)]. Figure 5(b) shows the same phase diagram as Fig. 5(a) using t' instead of t as the unit of energy to allow an easier comparison with the results of Ref. [34].

It is interesting to compare the phase diagram of Fig. 5(a) with the one presented in Ref. [63] for the half-filled square lattice with nearest-neighbor hopping (more suited to the study of cuprates). This model is different and the method is the variational cluster approximation [64], but it presents the same collinear magnetic phase with ordering wave vector $(0, \pi)$ or $(\pi, 0)$, for t'/t larger than $t'/t \approx 0.9$.

IV. CHOICE OF CDMFT CLUSTER

We saw that the results obtained with the Q1d cluster differ from those for the SP cluster. We have checked that the assumption that the Mott transition occurs when U is of the order of the bandwidth is not sufficient to choose the appropriate cluster, although in this context the nonmonotonic dependence on t'/t of the Mott metal-insulator transition is suggestive of the inadequacy of the Q1d cluster. However, based on the symmetries satisfied by the SP cluster, as illustrated in Fig. 1, it should capture the correct physics. This is confirmed by the fact that the predictions for the magnetic state obtained with the SP cluster agree with the results of other methods that are available for comparisons. With the Q1d cluster there is no commensurate magnetic state at all in the M1d regime while other methods find stable magnetic long-range order.

First, we searched for a collinear magnetic state $(0, \pi)$ using the restricted Hartree-Fock approximation on a 18×18 cluster. This method allows one, in principle, to map the phase diagram for a large but finite number of magnetic states and to study larger clusters than in CDMFT. Here, we used Hartree-Fock just to confirm our magnetic phase diagram in the M1d regime for the SP cluster. We thus allowed only two magnetic states: the Néel order and the collinear magnetic state. Even though CDMFT and Hartree-Fock methods cannot be compared quantitatively, a qualitative agreement is found: For $0 < t'/t \lesssim 1$, a first-order metal to antiferromagnetic (π, π) insulator transition takes place at a finite interaction U_c/t , whereas for $t'/t \geq 1.2$, a first order metal to collinear magnetic insulator transition is found. Although the same magnetic states and the same order of transition are found in the same range of t'/t as in the CDMFT plus ED solver method, the critical Hartree-Fock interaction U_c/t has a lower value, around $U_c/t \approx 6$, mainly due to the fact that the Hartree-Fock method is purely a mean-field theory that neglects the fluctuations that renormalize down the value of the interaction. Kanamori-Brückner screening is an example of renormalization mechanism that is neglected in Hartree-Fock.

Finally, the critical interaction for collinear magnetism found with the SP cluster exhibits qualitatively the same dependency on frustration as in the phase diagram of Ref. [34] obtained by variational methods. The phase diagram in

Fig. 5(b) presents our results with the same axis as in Ref. [34] to ease the comparison.

Even though it is not a rigorous proof, the fact that the appearance of a collinear magnetic state for $1.3 \leq t'/t \leq 2$ is supported by three different numerical methods gives solid arguments in favor of its presence in this region of the phase diagram. The lack of collinear magnetism with the Q1d cluster is an additional argument, beyond symmetry, to reject that cluster.

V. CONCLUSION

In the moderately one-dimensional regime of the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice, a symmetry-preserving cluster should be preferred to a quasi-one-dimensional cluster geometry for calculations with cluster dynamical mean-field theory. The symmetry-preserving cluster gives magnetic phases in agreement with other methods.

With the symmetry-preserving cluster, we obtained the phase diagram using CDMFT with an exact diagonalization solver in the moderately one-dimensional regime. There is a line of first-order Mott transition where the critical U/t monotonically increases with t'/t . We also found a first-order metal-to-collinear magnetic state transition that occurs for $t'/t \geq 1.3$ and does not allow any spin liquid state to appear in this regime. For $0.7 \leq t'/t \leq 1.2$, no sign of magnetic states covering the metal-insulator transition has been found. A spin liquid or a magnetic order which is not commensurate with our cluster, such as a spiral order, might however appear in this regime.

Our results at $t'/t \simeq 1.5$ are particularly relevant for experiment since they are supposed to describe the organic compound $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ that seems to be a good candidate for a spin liquid state [6]. At $t'/t \simeq 1.5$, the collinear magnetic state appears at a critical interaction strength that is lower than the Mott critical interaction in the normal state. This suggests that there cannot be a spin liquid state, i.e., a non-magnetic insulating state at zero temperature, since a magnetic phase covers the Mott metal-insulator transition. However, the comparison with the real material is not straightforward since we did not include multiband effects, near-neighbor repulsion etc. Moreover, possible uncertainties in the value of t'/t coming from *ab initio* methods [10,17] can make the real material $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ behave differently from our model.

ACKNOWLEDGMENTS

We are grateful to R. Valenti, S. Verret, and especially M. Gringas for numerous suggestions and discussions. We also thank P. Sémon for the CTQMC impurity solver. This work has been supported by the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) under Grant No. RGPIN-2014-04584, and by the Research Chair in the Theory of Quantum Materials at Université de Sherbrooke (A.-M.S.T.). Simulations were performed on computers provided by Canadian Foundation for Innovation, the Ministère de l'Éducation des Loisirs et du Sport (Québec), Calcul Québec, and Compute Canada.

- [1] B. J. Powell and R. H. McKenzie, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 056501 (2011).
- [2] B. J. Powell and R. H. McKenzie, *J. Phys. Condens. Matter* **18**, R827 (2006).
- [3] S. Lefebvre, P. Wzietek, S. Brown, C. Bourbonnais, D. Jérôme, C. Mézière, M. Fourmigué, and P. Batail, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5420 (2000).
- [4] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, and G. Saito, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 107001 (2003).
- [5] Y. Kurosaki, Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, and G. Saito, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 177001 (2005).
- [6] T. Isono, H. Kamo, A. Ueda, K. Takahashi, M. Kimata, H. Tajima, S. Tsuchiya, T. Terashima, S. Uji, and H. Mori, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 177201 (2014).
- [7] M. Tamura, H. Tajima, K. Yakushi, H. Kuroda, A. Kobayashi, R. Kato, and H. Kobayashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 3861 (1991).
- [8] H. Kino and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 2158 (1996).
- [9] R. H. McKenzie, *Science* **278**, 820 (1997).
- [10] H. O. Jeschke, M. de Souza, R. Valenti, R. S. Manna, M. Lang, and J. A. Schlueter, *Phys. Rev. B* **85**, 035125 (2012).
- [11] L. Balents, *Nature (London)* **464**, 199 (2010).
- [12] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [13] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001).
- [14] A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **62**, R9283 (2000).
- [15] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [16] The reader interested in superconductivity in organic Mott insulators can refer to excellent reviews such as Ref. [2] and Ref. [1].
- [17] H. C. Kandpal, I. Opahle, Y.-Z. Zhang, H. O. Jeschke, and R. Valenti, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 067004 (2009).
- [18] K. Nakamura, Y. Yoshimoto, T. Kosugi, R. Arita, and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 083710 (2009).
- [19] K. Nakamura, Y. Yoshimoto, and M. Imada, *Phys. Rev. B* **86**, 205117 (2012).
- [20] D. Guterding, M. Altmeyer, H. O. Jeschke, and R. Valenti, *Phys. Rev. B* **94**, 024515 (2016).
- [21] T. Tsumuraya, H. Seo, R. Kato, and T. Miyazaki, *Phys. Rev. B* **92**, 035102 (2015).
- [22] H. Morita, S. Watanabe, and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 2109 (2002).
- [23] T. Watanabe, H. Yokoyama, Y. Tanaka, and J. ichiro Inoue, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 074707 (2006).
- [24] T. Watanabe, H. Yokoyama, Y. Tanaka, and J. Inoue, *Phys. Rev. B* **77**, 214505 (2008).
- [25] R. T. Clay, H. Li, and S. Mazumdar, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 166403 (2008).
- [26] P. Sahebsara and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 257004 (2006).
- [27] O. Parcollet, G. Biroli, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 226402 (2004).
- [28] B. Kyung and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 046402 (2006).
- [29] B. Kyung, *Phys. Rev. B* **75**, 033102 (2007).
- [30] T. Ohashi, T. Momoi, H. Tsunetsugu, and N. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 076402 (2008).
- [31] H. Lee, G. Li, and H. Monien, *Phys. Rev. B* **78**, 205117 (2008).
- [32] P. Sahebsara and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136402 (2008).
- [33] L. F. Tocchio, H. Feldner, F. Becca, R. Valentí, and C. Gros, *Phys. Rev. B* **87**, 035143 (2013).
- [34] L. F. Tocchio, C. Gros, R. Valentí, and F. Becca, *Phys. Rev. B* **89**, 235107 (2014).
- [35] A. Yamada, *Phys. Rev. B* **90**, 235138 (2014).
- [36] A. H. MacDonald, S. M. Girvin, and D. Yoshioka, *Phys. Rev. B* **37**, 9753 (1988).
- [37] L. Balents and A. Paramekanti, *Phys. Rev. B* **67**, 134427 (2003).
- [38] J. Merino, R. H. McKenzie, J. B. Marston, and C. H. Chung, *J. Phys. Condens. Matter* **11**, 2965 (1999).
- [39] A. E. Trumper, *Phys. Rev. B* **60**, 2987 (1999).
- [40] R. F. Bishop, P. H. Y. Li, D. J. J. Farnell, and C. E. Campbell, *Phys. Rev. B* **79**, 174405 (2009).
- [41] S. Yunoki and S. Sorella, *Phys. Rev. B* **74**, 014408 (2006).
- [42] D. Heidarian, S. Sorella, and F. Becca, *Phys. Rev. B* **80**, 012404 (2009).
- [43] M. Q. Weng, D. N. Sheng, Z. Y. Weng, and R. J. Bursill, *Phys. Rev. B* **74**, 012407 (2006).
- [44] M. Holt, B. J. Powell, and J. Merino, *Phys. Rev. B* **89**, 174415 (2014).
- [45] R. N. Lyubovskaya, E. A. Zhilyaeva, A. V. Zvarykina, V. N. Laukhin, R. B. Lyubovskii and S. I. Pesotskii, *JETP Lett.* **45**, 530 (1987).
- [46] R. N. Lyubovskaya, E. I. Zhilyaeva, S. I. Pesotskii, R. B. Lyubovskii, L. O. Atovmyan, O. A. D'yachenko and T. G. Takhirov, *JETP Lett.* **46**, 188 (1987).
- [47] H. Oike, K. Miyagawa, H. Taniguchi, and K. Kanoda, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 067002 (2015).
- [48] H. Oike, Y. Suzuki, H. Taniguchi, K. Miyagawa, and K. Kanoda, [arXiv:1602.08950](https://arxiv.org/abs/1602.08950).
- [49] T. Watanabe, H. Yokoyama, and M. Ogata, *JPS Conf. Proc.* **3**, 013004 (2014).
- [50] C.-D. Hébert, P. Sémon, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **92**, 195112 (2015).
- [51] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027 (2005).
- [52] D. Sénéchal, [arXiv:0806.2690](https://arxiv.org/abs/0806.2690).
- [53] M. Caffarel and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1545 (1994).
- [54] M. Troyer and U.-J. Wiese, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 170201 (2005).
- [55] D. Sénéchal, *Phys. Rev. B* **81**, 235125 (2010).
- [56] M. Charlebois, D. Sénéchal, A.-M. Gagnon, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **91**, 035132 (2015).
- [57] K. Haule, *Phys. Rev. B* **75**, 155113 (2007).
- [58] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349 (2011).
- [59] We thank P. Sémon for providing us the impurity solver for the CTQMC calculation.
- [60] S. Sakai, G. Sangiovanni, M. Civelli, Y. Motome, K. Held, and M. Imada, *Phys. Rev. B* **85**, 035102 (2012).
- [61] M. Laubach, R. Thomale, C. Platt, W. Hanke, and G. Li, *Phys. Rev. B* **91**, 245125 (2015).
- [62] O. A. Starykh, H. Katsura, and L. Balents, *Phys. Rev. B* **82**, 014421 (2010).
- [63] A. H. Nevidomskyy, C. Scheiber, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **77**, 064427 (2008).
- [64] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 206402 (2003).

Bibliographie

- [1] Paul Dirac. *The quantum theory of the electron*. [Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences](#) **117**(778), 610–624 (1928).
- [2] Hermann Weyl. *GRAVITATION AND THE ELECTRON*. [Proceedings of the National Academy of Sciences](#) **15**(4), 323–334 (1929).
- [3] N. P. Armitage, E. J. Mele et Ashvin Vishwanath. *Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids*. [Rev. Mod. Phys.](#) **90**, 015001 (2018).
- [4] Arthur B. McDonald. *Nobel Lecture : The Sudbury Neutrino Observatory : Observation of flavor change for solar neutrinos*. [Rev. Mod. Phys.](#) **88**, 030502 (2016).
- [5] Takaaki Kajita. *Nobel Lecture : Discovery of atmospheric neutrino oscillations*. [Rev. Mod. Phys.](#) **88**, 030501 (2016).
- [6] Kai-Yu Yang, Yuan-Ming Lu et Ying Ran. *Quantum Hall effects in a Weyl semimetal : Possible application in pyrochlore iridates*. [Phys. Rev. B](#) **84**, 075129 (2011).
- [7] L. X. Yang, Z. K. Liu, Y. Sun, H. Peng, H. F. Yang, T. Zhang, B. Zhou, Y. Zhang, Y. F. Guo, M. Rahn, D. Prabhakaran, Z. Hussain, S.-K. Mo, C. Felser, B. Yan et Y. L. Chen. *Weyl semimetal phase in the non-centrosymmetric compound TaAs*. [Nature Physics](#) **11**(9), 728–732 (2015).
- [8] B. Q. Lv, H. M. Weng, B. B. Fu, X. P. Wang, H. Miao, J. Ma, P. Richard, X. C. Huang, L. X. Zhao, G. F. Chen, Z. Fang, X. Dai, T. Qian et H. Ding. *Experimental Discovery of Weyl Semimetal TaAs*. [Phys. Rev. X](#) **5**, 031013 (2015).
- [9] B. Q. Lv, N. Xu, H. M. Weng, J. Z. Ma, P. Richard, X. C. Huang, L. X. Zhao, G. F. Chen, C. E. Matt, F. Bisti, V. N. Strocov, J. Mesot, Z. Fang, X. Dai, T. Qian, M. Shi et H. Ding. *Observation of Weyl nodes in TaAs*. [Nature Physics](#) **11**(9), 724–727 (2015).
- [10] Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Nasser Alidoust, Madhab Neupane, Guang Bian, Chenglong Zhang, Raman Sankar, Guoqing Chang, Zhujun Yuan, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Hao Zheng, Jie Ma, Daniel S. Sanchez, BaoKai Wang, Arun Bansil, Fangcheng Chou, Pavel P. Shibayev, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. *Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs*. [Science](#) **349**(6248), 613–617 (2015).
- [11] Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Daniel S. Sanchez, Madhab Neupane, Guoqing Chang, Koichiro Yaji, Zhujun Yuan, Chenglong Zhang, Kenta Kuroda, Guang Bian, Cheng Guo, Hong Lu, Tay-Rong Chang, Nasser Alidoust, Hao Zheng, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Chuang-Han Hsu, Horng-Tay Jeng, Arun Bansil, Titus Neupert, Fumio Komori, Takeshi Kondo, Shik Shin, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. *Spin Polarization and Texture of the Fermi Arcs in the Weyl Fermion Semimetal TaAs*. [Phys. Rev. Lett.](#) **116**, 096801 (2016).
- [12] Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Daniel S. Sanchez, Chenglong Zhang, Guoqing Chang, Cheng Guo, Guang Bian, Zhujun Yuan, Hong Lu, Tay-Rong Chang, Pavel P. Shibayev, Mykhailo L. Prokopovych, Nasser Alidoust, Hao Zheng, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Raman Sankar,

- Fangcheng Chou, Chuang-Han Hsu, Horng-Tay Jeng, Arun Bansil, Titus Neupert, Vladimir N. Strocov, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. *Experimental discovery of a topological Weyl semimetal state in TaP*. [Science Advances](#) **1**(10), e1501092 (2015).
- [13] Su-Yang Xu, Nasser Alidoust, Ilya Belopolski, ZhuJun Yuan, Guang Bian, Tay-Rong Chang, Hao Zheng, Vladimir N. Strocov, Daniel S. Sanchez, Guoqing Chang, Chenglong Zhang, Daixiang Mou, Yun Wu, Lunan Huang, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, BaoKai Wang, Arun Bansil, Horng-Tay Jeng, Titus Neupert, Adam Kaminski, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. *Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide*. [Nature Physics](#) **11**(9), 748–754 (2015).
- [14] N. Xu, H. M. Weng, B. Q. Lv, C. E. Matt, J. Park, F. Bisti, V. N. Strocov, D. Gawryluk, E. Pomjakushina, K. Conder, N. C. Plumb, M. Radovic, G. Autès, O. V. Yazyev, Z. Fang, X. Dai, T. Qian, J. Mesot, H. Ding et M. Shi. *Observation of Weyl nodes and Fermi arcs in tantalum phosphide*. [Nature Communications](#) **7**, 11006 (2016).
- [15] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov et A. K. Geim. *The electronic properties of graphene*. [Rev. Mod. Phys.](#) **81**, 109–162 (2009).
- [16] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi et Shou-Cheng Zhang. *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*. [Science](#) **318**(5851), 766–770 (2007).
- [17] Markus König, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Taylor Hughes, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi et Shou-Cheng Zhang. *The Quantum Spin Hall Effect : Theory and Experiment*. [Journal of the Physical Society of Japan](#) **77**(3), 031007 (2008).
- [18] Michael Victor Berry. *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*. [Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences](#) **392**(1802), 45–57 (1984).
- [19] Jean Dalibard. *La matière topologique et son exploration avec les gaz quantiques.*, (2018).
- [20] Di Xiao, Ming-Che Chang et Qian Niu. *Berry phase effects on electronic properties*. [Rev. Mod. Phys.](#) **82**, 1959–2007 (2010).
- [21] H.B. Nielsen et M. Ninomiya. *Absence of neutrinos on a lattice : (I). Proof by homotopy theory*. [Nuclear Physics B](#) **185**(1), 20 – 40 (1981).
- [22] H.B. Nielsen et M. Ninomiya. *Absence of neutrinos on a lattice : (II). Intuitive topological proof*. [Nuclear Physics B](#) **193**(1), 173 – 194 (1981).
- [23] Pavan Hosur et Xiaoliang Qi. *Recent developments in transport phenomena in Weyl semimetals*. [Comptes Rendus Physique](#) **14**(9), 857 – 870 (2013).
- [24] J. M. Ziman. *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge University Press, 2e édition, (1972). doi :10.1017/CBO9781139644075.
- [25] F. D. M. Haldane. *Berry Curvature on the Fermi Surface : Anomalous Hall Effect as a Topological Fermi-Liquid Property*. [Phys. Rev. Lett.](#) **93**, 206602 (2004).
- [26] Stephen L. Adler. *Axial-Vector Vertex in Spinor Electrodynamics*. [Phys. Rev.](#) **177**, 2426–2438 (1969).
- [27] J. S. Bell et R. Jackiw. *A PCAC puzzle : $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ in the σ -model*. [Nuovo Cimento A Serie](#) **60**, 47–61 (1969).
- [28] H. B. Nielsen et M. Ninomiya. *The Adler-Bell-Jackiw anomaly and Weyl fermions in a crystal*. [Physics Letters B](#) **130**, 389–396 (1983).
- [29] D. T. Son et B. Z. Spivak. *Chiral anomaly and classical negative magnetoresistance of Weyl metals*. [Phys. Rev. B](#) **88**, 104412 (2013).
- [30] Ilya Belopolski, Su-Yang Xu, Daniel S. Sanchez, Guoqing Chang, Cheng Guo, Madhab Neupane, Hao Zheng, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Guang Bian, Nasser Alidoust, Tay-Rong Chang, BaoKai Wang, Xiao Zhang, Arun Bansil, Horng-Tay Jeng, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. *Criteria for Directly Detecting Topological Fermi Arcs in Weyl Semimetals*. [Phys. Rev. Lett.](#) **116**, 066802 (2016).

- [31] Xiangang Wan, Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath et Sergey Y. Savrasov. *Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates*. *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011).
- [32] Gang Xu, Hongming Weng, Zhijun Wang, Xi Dai et Zhong Fang. *Chern Semimetal and the Quantized Anomalous Hall Effect in HgCr_2Se_4* . *Phys. Rev. Lett.* **107**, 186806 (2011).
- [33] Shin-Ming Huang, Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Chi-Cheng Lee, Guoqing Chang, BaoKai Wang, Nasser Alidoust, Guang Bian, Madhab Neupane, Chenglong Zhang, Shuang Jia, Arun Bansil, Hsin Lin et M. Zahid Hasan. *A Weyl Fermion semimetal with surface Fermi arcs in the transition metal monpnictide TaAs class*. *Nature Communications* **6** (2015).
- [34] Hongming Weng, Chen Fang, Zhong Fang, B. Andrei Bernevig et Xi Dai. *Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition-Metal Monophosphides*. *Phys. Rev. X* **5**, 011029 (2015).
- [35] Pallab Goswami, J. H. Pixley et S. Das Sarma. *Axial anomaly and longitudinal magnetoresistance of a generic three-dimensional metal*. *Phys. Rev. B* **92**, 075205 (2015).
- [36] Frank Arnold, Chandra Shekhar, Shu-Chun Wu, Yan Sun, Ricardo Donizeth dos Reis, Nitesh Kumar, Marcel Naumann, Mukkattu O. Ajeesh, Marcus Schmidt, Adolfo G. Grushin, Jens H. Bardarson, Michael Baenitz, Dmitry Sokolov, Horst Borrmann, Michael Nicklas, Claudia Felser, Elena Hassinger et Binghai Yan. *Negative magnetoresistance without well-defined chirality in the Weyl semimetal TaP*. *Nature Communications* **7**, 11615 (2016).
- [37] Z. K. Liu, L. X. Yang, Y. Sun, T. Zhang, H. Peng, H. F. Yang, C. Chen, Y. Zhang, Y. F. Guo, D. Prabhakaran, M. Schmidt, Z. Hussain, S.-K. Mo, C. Felser, B. Yan et Y. L. Chen. *Evolution of the Fermi surface of Weyl semimetals in the transition metal pnictide family*. *Nature Materials* **15**(1), 27–31 (2016).
- [38] J. Klotz, Shu-Chun Wu, Chandra Shekhar, Yan Sun, Marcus Schmidt, Michael Nicklas, Michael Baenitz, M. Uhlarz, J. Wosnitza, Claudia Felser et Binghai Yan. *Quantum oscillations and the Fermi surface topology of the Weyl semimetal NbP*. *Phys. Rev. B* **93**, 121105 (2016).
- [39] K. Kuroda, T. Tomita, M.-T. Suzuki, C. Bareille, A. A. Nugroho, P. Goswami, M. Ochi, M. Ikhlas, M. Nakayama, S. Akebi, R. Noguchi, R. Ishii, N. Inami, K. Ono, H. Kumigashira, A. Varykhalov, T. Muro, T. Koretsune, R. Arita, S. Shin, Takeshi Kondo et S. Nakatsuji. *Evidence for magnetic Weyl fermions in a correlated metal*. *Nature Materials advance online publication* (2017).
- [40] Enke Liu, Yan Sun, Nitesh Kumar, Lukas Muechler, Aili Sun, Lin Jiao, Shuo-Ying Yang, Defa Liu, Aiji Liang, Qiunan Xu, Johannes Kroder, Vicky Süß, Horst Borrmann, Chandra Shekhar, Zhaosheng Wang, Chuanying Xi, Wenhong Wang, Walter Schnelle, Steffen Wirth, Yulin Chen, Sebastian T. B. Goennenwein et Claudia Felser. *Giant anomalous Hall effect in a ferromagnetic kagome-lattice semimetal*. *Nature Physics* **14**(11), 1125 (2018).
- [41] Satoru Nakatsuji, Naoki Kiyohara et Tomoya Higo. *Large anomalous Hall effect in a non-collinear antiferromagnet at room temperature*. *Nature* **527**(7577), 212–215 (2015).
- [42] G. R. Stewart. *Heavy-fermion systems*. *Rev. Mod. Phys.* **56**, 755–787 (1984).
- [43] J. G. Bednorz et K. A. Müller. *Possible High- T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system*. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64**(2), 189–193 (1986).
- [44] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth et Marcelo J. Rozenberg. *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*. *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13–125 (1996).
- [45] Walter Metzner et Dieter Vollhardt. *Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions*. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324–327 (1989).
- [46] Antoine Georges et Gabriel Kotliar. *Hubbard model in infinite dimensions*. *Phys. Rev. B* **45**, 6479–6483 (1992).

- [47] M. Jarrell. *Hubbard model in infinite dimensions : A quantum Monte Carlo study*. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 168–171 (1992).
- [48] A.-M. S. Tremblay. *The Many-Body problem, from perturbation theory to dynamical-mean-field theory (lecture notes)*. unpublished, (2017). <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.56.755>.
- [49] G.A. Baker. *Essentials of Padé approximants*. Academic Press, (1975). <https://www.elsevier.com/books/essentials-of-pade-approximants/baker/978-0-12-074855-6>.
- [50] H. J. Vidberg et J. W. Serene. *Solving the Eliashberg equations by means of N-point Padé approximants*. *Journal of Low Temperature Physics* **29**(3) (1977).
- [51] Dominic Bergeron et A.-M. S. Tremblay. *Algorithms for optimized maximum entropy and diagnostic tools for analytic continuation*. *Phys. Rev. E* **94**, 023303 (2016).
- [52] Martin C. Gutzwiller. *Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals*. *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159–162 (1963).
- [53] Junjiro Kanamori. *Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals*. *Progress of Theoretical Physics* **30**(3), 275–289 (1963).
- [54] Hubbard J. *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **276**(1365), 238–257 (1963).
- [55] Hubbard J. *Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution*. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **281**(1386), 401–419 (1964).
- [56] Gabriel Kotliar et Dieter Vollhardt. *Strongly Correlated Materials : Insights From Dynamical Mean-Field Theory*. *Physics Today* **57**(3), 53–59 (2004).
- [57] E. H. Lieb et F. Y. Wu. *The one-dimensional Hubbard model : A reminiscence*. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* **321**(1), 1–27 (1968).
- [58] P. W. Anderson. *Localized Magnetic States in Metals*. *Phys. Rev.* **124**, 41–53 (1961).
- [59] P. A. Wolff. *Localized Moments in Metals*. *Phys. Rev.* **124**, 1030–1035 (1961).
- [60] J. E. Hirsch et R. M. Fye. *Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals*. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2521–2524 (1986).
- [61] Michel Caffarel et Werner Krauth. *Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions : Mott transition and superconductivity*. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1545–1548 (1994).
- [62] Emanuel Gull, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer et Philipp Werner. *Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models*. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349–404 (2011).
- [63] Hisatoshi Yokoyama et Hiroyuki Shiba. *Variational Monte-Carlo Studies of Hubbard Model. I*. *Journal of the Physical Society of Japan* **56**(4), 1490–1506 (1987).
- [64] Daisuke Tahara et Masatoshi Imada. *Variational Monte Carlo Method Combined with Quantum-Number Projection and Multi-Variable Optimization*. *Journal of the Physical Society of Japan* **77**(11), 114701 (2008).
- [65] Henrik Kajueter et Gabriel Kotliar. *New Iterative Perturbation Scheme for Lattice Models with Arbitrary Filling*. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 131–134 (1996).
- [66] Louis-Fran çois Arsenault, Patrick Sémon et A.-M. S. Tremblay. *Benchmark of a modified iterated perturbation theory approach on the fcc lattice at strong coupling*. *Phys. Rev. B* **86**, 085133 (2012).
- [67] A. Martín-Rodero, E. Louis, F. Flores et C. Tejedor. *Interpolative solution for the periodic Anderson model of mixed-valence compounds*. *Phys. Rev. B* **33**, 1814–1822 (1986).
- [68] Erik Koch, Giorgio Sangiovanni et Olle Gunnarsson. *Sum rules and bath parametrization for quantum cluster theories*. *Phys. Rev. B* **78**, 115102 (2008).

- [69] Louis-François Arsenault. *Nouvelles approches en théorie du champ moyen dynamique : le cas du pouvoir thermoélectrique et celui de l'effet orbital d'un champ magnétique*. Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, (2013).
- [70] Maxime Charlebois. *Théorie de champ moyen dynamique pour les systèmes inhomogènes*. Thèse de Doctorat, université Laval, (2015).
- [71] Johannes Hofmann, Edwin Barnes et S. Das Sarma. *Interacting Dirac liquid in three-dimensional semimetals*. *Phys. Rev. B* **92**, 045104 (2015).
- [72] Joseph Maciejko et Rahul Nandkishore. *Weyl semimetals with short-range interactions*. *Phys. Rev. B* **90**, 035126 (2014).
- [73] William Witczak-Krempa, Michael Knap et Dmitry Abanin. *Interacting Weyl Semimetals : Characterization via the Topological Hamiltonian and its Breakdown*. *Phys. Rev. Lett.* **113**, 136402 (2014).
- [74] Manuel Laubach, Christian Platt, Ronny Thomale, Titus Neupert et Stephan Rachel. *Density wave instabilities and surface state evolution in interacting Weyl semimetals*. *Phys. Rev. B* **94**, 241102 (2016).
- [75] R. Nourafkan et G. Kotliar. *Electric polarization in correlated insulators*. *Phys. Rev. B* **88**, 155121 (2013).
- [76] A.A Abrikosov et S.D Beneslavskii. *Possible existence of substances intermediate between metals and dielectrics*. Soviet physics JETP (1971).
- [77] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams et A. E. Ruckenstein. *Phenomenology of the normal state of Cu-O high-temperature superconductors*. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1996–1999 (1989).
- [78] S. Acheche, R. Nourafkan et A.-M. S. Tremblay. *Orbital magnetization and anomalous Hall effect in interacting Weyl semimetals*. *arxiv* , 1807.07508 (2018).
- [79] E.H.Hall Ph.D. XVIII. *On the "Rotational Coefficient" in nickel and cobalt*. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **12(74)**, 157–172 (1881).
- [80] Di Xiao, Junren Shi et Qian Niu. *Berry Phase Correction to Electron Density of States in Solids*. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137204 (2005).
- [81] T. Thonhauser, Davide Ceresoli, David Vanderbilt et R. Resta. *Orbital Magnetization in Periodic Insulators*. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137205 (2005).
- [82] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Plenum Press New York, New York, N.Y., 2nde édition, (1993).
- [83] Klaus von Klitzing. *The quantized Hall effect*. *Rev. Mod. Phys.* **58**, 519–531 (1986).
- [84] A. A. Burkov et Leon Balents. *Weyl Semimetal in a Topological Insulator Multilayer*. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 127205 (2011).
- [85] A. A. Burkov. *Anomalous Hall Effect in Weyl Metals*. *Phys. Rev. Lett.* **113**, 187202 (2014).
- [86] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale et M. den Nijs. *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405–408 (1982).
- [87] R. B. Laughlin. *Quantized Hall conductivity in two dimensions*. *Phys. Rev. B* **23**, 5632–5633 (1981).
- [88] Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang et Shou-Cheng Zhang. *Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface*. *Nature Physics* **5**, 438 (2009).
- [89] P Streda. *Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions*. *Journal of Physics C : Solid State Physics* **15(22)**, L717 (1982).
- [90] T. Thonhauser. *Theory of orbital magnetization in solids*. *International Journal of Modern Physics B* **25(11)**, 1429–1458 (2011).

- [91] Francesco Mauri et Steven G. Louie. *Magnetic Susceptibility of Insulators from First Principles*. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4246–4249 (1996).
- [92] Chris J. Pickard et Francesco Mauri. *First-Principles Theory of the EPR g Tensor in Solids : Defects in Quartz*. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 086403 (2002).
- [93] Daniel Sebastiani, Gillian Goward, Ingo Schnell et Michele Parrinello. *NMR chemical shifts in periodic systems from first principles*. *Computer Physics Communications* **147**(1), 707 – 710 (2002). Proceedings of the Europhysics Conference on Computational Physics Computational Modeling and Simulation of Complex Systems.
- [94] R. Nourafkan, G. Kotliar et A.-M. S. Tremblay. *Orbital magnetization of correlated electrons with arbitrary band topology*. *Phys. Rev. B* **90**, 125132 (2014).
- [95] S. Acheche, L.-F. Arsenault et A.-M. S. Tremblay. *Orbital effect of the magnetic field in dynamical mean-field theory*. *Phys. Rev. B* **96**, 235135 (2017).
- [96] N.W. Ashcroft et N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, Philadelphia, (1976).
- [97] I. M. Lifshitz et A. M. Kosevich. *No title*. *Zh. Eksp. Teor. Phys.* **29**, 730 (1955).
- [98] Mahito Kohmoto. *Topological invariant and the quantization of the Hall conductance*. *Annals of Physics* **160**(2), 343 – 354 (1985).
- [99] Douglas R. Hofstadter. *Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*. *Phys. Rev. B* **14**, 2239–2249 (1976).
- [100] C. R. Dean, L. Wang, P. Maher, C. Forsythe, F. Ghahari, Y. Gao, J. Katoch, M. Ishigami, P. Moon, M. Koshino, T. Taniguchi, K. Watanabe, K. L. Shepard, J. Hone et P. Kim. *Hofstadter’s butterfly and the fractal quantum Hall effect in moire superlattices*. *Nature* **497**(7451), 598–602 (2013).
- [101] Mahito Kohmoto. *Zero modes and the quantized Hall conductance of the two-dimensional lattice in a magnetic field*. *Phys. Rev. B* **39**, 11943–11949 (1989).
- [102] M Snoek, I Titvinidze, C Tóke, K Byczuk et W Hofstetter. *Antiferromagnetic order of strongly interacting fermions in a trap : real-space dynamical mean-field analysis*. *New Journal of Physics* **10**(9), 093008 (2008).
- [103] Daniel Cocks, Peter P. Orth, Stephan Rachel, Michael Buchhold, Karyn Le Hur et Walter Hofstetter. *Time-Reversal-Invariant Hofstadter-Hubbard Model with Ultracold Fermions*. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 205303 (2012).
- [104] M. Khodas et A. M. Finkel’stein. *Hall coefficient in an interacting electron gas*. *Phys. Rev. B* **68**, 155114 (2003).
- [105] Kuang-Ting Chen et Patrick A. Lee. *Unified formalism for calculating polarization, magnetization, and more in a periodic insulator*. *Phys. Rev. B* **84**, 205137 (2011).
- [106] Takafumi Kita et Masao Arai. *Theory of Interacting Bloch Electrons in a Magnetic Field*. *Journal of the Physical Society of Japan* **74**(10), 2813–2830 (2005).
- [107] Thomas Maier, Mark Jarrell, Thomas Pruschke et Matthias H. Hettler. *Quantum cluster theories*. *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027–1080 (2005).
- [108] A. I. Lichtenstein et M. I. Katsnelson. *Antiferromagnetism and d -wave superconductivity in cuprates : A cluster dynamical mean-field theory*. *Phys. Rev. B* **62**, R9283–R9286 (2000).
- [109] Gabriel Kotliar, Sergej Y. Savrasov, Gunnar Pálsson et Giulio Biroli. *Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems*. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001).
- [110] M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell et H. R. Krishnamurthy. *Dynamical cluster approximation : Nonlocal dynamics of correlated electron systems*. *Phys. Rev. B* **61**, 12739–12756 (2000).
- [111] Ralf Bulla, Theo A. Costi et Thomas Pruschke. *Numerical renormalization group method for quantum impurity systems*. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 395–450 (2008).

- [112] Vidar Gudmundsson et Rolf R. Gerhardtts. *Effects of screening on the Hofstadter butterfly*. *Phys. Rev. B* **52**, 16744–16752 (1995).
- [113] Archana Mishra, S. R. Hassan et R. Shankar. *Effects of interaction in the Hofstadter regime of the honeycomb lattice*. *Phys. Rev. B* **93**, 125134 (2016).
- [114] Hyeonjin Doh et Sung-Ho Suck Salk. *Effects of electron correlations on the Hofstadter spectrum*. *Phys. Rev. B* **57**, 1312–1315 (1998).
- [115] Minh-Tien Tran. *Electronic structure of the Falicov-Kimball model with a magnetic field : Dynamical mean-field study*. *Phys. Rev. B* **81**, 115119 (2010).
- [116] Pramod Kumar, Thomas Mertz et Walter Hofstetter. *Interaction-induced topological and magnetic phases in the Hofstadter-Hubbard model*. *Phys. Rev. B* **94**, 115161 (2016).
- [117] Walter Kohn. *Cyclotron Resonance and de Haas-van Alphen Oscillations of an Interacting Electron Gas*. *Phys. Rev.* **123**, 1242–1244 (1961).
- [118] J. Friedel. XIV. *The distribution of electrons round impurities in monovalent metals*. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **43**(337), 153–189 (1952).
- [119] J. S. Langer et V. Ambegaokar. *Friedel Sum Rule for a System of Interacting Electrons*. *Phys. Rev.* **121**, 1090–1092 (1961).
- [120] R. Nourafkan et A.-M. S. Tremblay. *Hall and Faraday effects in interacting multiband systems with arbitrary band topology and spin-orbit coupling*. *Phys. Rev. B* **98**, 165130 (2018).
- [121] Xiaoyu Deng, Jernej Mravlje, Rok Žitko, Michel Ferrero, Gabriel Kotliar et Antoine Georges. *How Bad Metals Turn Good : Spectroscopic Signatures of Resilient Quasiparticles*. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 086401 (2013).
- [122] Phillip E. C. Ashby et J. P. Carbotte. *Magneto-optical conductivity of Weyl semimetals*. *Phys. Rev. B* **87**, 245131 (2013).
- [123] Pierre F. Maldague. *Optical spectrum of a Hubbard chain*. *Phys. Rev. B* **16**, 2437–2446 (1977).
- [124] Piers Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 1re édition, (2016).
- [125] Fenner Harper, Steven H. Simon et Rahul Roy. *Perturbative approach to flat Chern bands in the Hofstadter model*. *Phys. Rev. B* **90**, 075104 (2014).
- [126] M Jafarpour et D Afshar. *An approach to quantum anharmonic oscillators via Lie algebra*. *Journal of Physics : Conference Series* **128**(1), 012055 (2008).
- [127] C. Alexander. *Explicit Calculations for Anharmonic Oscillators Using Lie Algebras*. ArXiv e-prints , 0902.4063 (2009).
- [128] S. Acheche, A. Reymbaut, M. Charlebois, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. *Mott transition and magnetism on the anisotropic triangular lattice*. *Phys. Rev. B* **94**, 245133 (2016).
- [129] Takayuki Isono, Hiromichi Kamo, Akira Ueda, Kazuyuki Takahashi, Motoi Kimata, Hiroyuki Tajima, Satoshi Tsuchiya, Taichi Terashima, Shinya Uji et Hatsumi Mori. *Gapless Quantum Spin Liquid in an Organic Spin-1/2 Triangular-Lattice $\kappa - \text{H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$* . *Phys. Rev. Lett.* **112**, 177201 (2014).
- [130] O. Parcollet, G. Biroli et G. Kotliar. *Cluster Dynamical Mean Field Analysis of the Mott Transition*. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 226402 (2004).
- [131] B. Kyung et A.-M. S. Tremblay. *Mott Transition, Antiferromagnetism, and d-Wave Superconductivity in Two-Dimensional Organic Conductors*. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 046402 (2006).
- [132] Takuma Ohashi, Tsutomu Momoi, Hirokazu Tsunetsugu et Norio Kawakami. *Finite Temperature Mott Transition in Hubbard Model on Anisotropic Triangular Lattice*. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 076402 (2008).